国家出版基金项目

NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

中外物理学精品书系

前沿系列 · 13

四元数物理学

许方官 著



北京大学出版社

PEKING UNIVERSITY PRESS

中外物理学精品书系·前沿系列13

四元数物理学

许方官 （1939—2010），江苏常州人，北京大学物理学院教授。1959年9月考入吉林大学物理系，同年被选拔至北京大学技术物理系核物理专业继续大学学习，1962—2002年在北京大学技术物理系工作。长期从事加速器的物理研究和设计工作，为北京大学回旋加速器、4.5MV静电加速器和螺旋波导加速器的物理设计工作做出了重要贡献。长期讲授本科生主干基础课，在教学工作中深入钻研、兢兢业业，是北京大学技术物理系普通物理课程改革和建设的主要教师之一，曾获1987—1988年度北京大学教学优秀奖、1990年北京大学教学优秀集体奖。

ISBN 978-7-301-20834-2



定价：35.00元



中外物理学精品书系

前沿系列·13

四元数物理学

许方官 著


北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

四元数物理学/许方官著. —北京:北京大学出版社,2012.7
(中外物理学精品书系·前沿系列)
ISBN 978-7-301-20834-2

Ⅰ.①四… Ⅱ.①许… Ⅲ.①四元数-应用-物理学 Ⅳ.①O4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 132383 号

书　　名:四元数物理学
著作责任者:许方官　著
责 任 编 辑:尹照原
标 准 书 号:ISBN 978-7-301-20834-2/O·0872
出 版 发 行:北京大学出版社
地　　址:北京市海淀区成府路 205 号　100871
网　　址:http://www.pup.cn
电　　话:邮购部 62752015　发行部 62750672　编辑部 62752021
　　　　　出版部 62754962
电 子 邮 箱:zpup@pup.pku.edu.cn
印　刷　者:北京中科印刷有限公司
经　销　者:新华书店
　　　　　730 毫米×980 毫米　16 开本　12.75 印张　236 千字
　　　　　2012 年 7 月第 1 版　2012 年 7 月第 1 次印刷
定　　价:35.00 元

《中外物理学精品书系》
编 委 会

序　　言

物理学是研究物质、能量以及它们之间相互作用的科学。她不仅是化学、生命、材料、信息、能源和环境等相关学科的基础，同时还是许多新兴学科和交叉学科的前沿。在科技发展日新月异和国际竞争日趋激烈的今天，物理学不仅囿于基础科学和技术应用研究的范畴，而且在社会发展与人类进步的历史进程中发挥着越来越关键的作用。

我们欣喜地看到，改革开放三十多年来，随着中国政治、经济、教育、文化等领域各项事业的持续稳定发展，我国物理学取得了跨越式的进步，做出了很多为世界瞩目的研究成果。今日的中国物理正在经历一个历史上少有的黄金时代。

在我国物理学科快速发展的背景下，近年来物理学相关书籍也呈现百花齐放的良好态势，在知识传承、学术交流、人才培养等方面发挥着无可替代的作用。从另一方面看，尽管国内各出版社相继推出了一些质量很高的物理教材和图书，但系统总结物理学各门类知识和发展，深入浅出地介绍其与现代科学技术之间的渊源，并针对不同层次的读者提供有价值的教材和研究参考，仍是我国科学传播与出版界面临的一个极富挑战性的课题。

为有力推动我国物理学研究、加快相关学科的建设与发展，特别是展现近年来中国物理学者的研究水平和成果，北京大学出版社在国家出版基金的支持下推出了《中外物理学精品书系》，试图对以上难题进行大胆的尝试和探索。该书系编委会集结了数十位来自内地和香港顶尖高校及科研院所的知名专家学者。他们都是目前该领域十分活跃的专家，确保了整套丛书的权威性和前瞻性。

这套书系内容丰富，涵盖面广，可读性强，其中既有对我国传统物理学发展的梳理和总结，也有对正在蓬勃发展的物理学前沿的全面展示；既引进和介绍了世界物理学研究的发展动态，也面向国际主流领域传播中国物理的优秀专著。可以说，《中外物理学精品书系》力图完整呈现近现代世界和中国物理

科学发展的全貌，是一部目前国内为数不多的兼具学术价值和阅读乐趣的经典物理丛书。

《中外物理学精品书系》另一个突出特点是，在把西方物理的精华要义“请进来”的同时，也将我国近现代物理的优秀成果“送出去”。物理学科在世界范围内的重要性不言而喻，引进和翻译世界物理的经典著作和前沿动态，可以满足当前国内物理教学和科研工作的迫切需求。另一方面，改革开放几十年来，我国的物理学研究取得了长足发展，一大批具有较高学术价值的著作相继问世。这套丛书首次将一些中国物理学者的优秀论著以英文版的形式直接推向国际相关研究的主流领域，使世界对中国物理学的过去和现状有更多的深入了解，不仅充分展示出中国物理学研究和积累的“硬实力”，也向世界主动传播我国科技文化领域不断创新的“软实力”，对全面提升中国科学、教育和文化领域的国际形象起到重要的促进作用。

值得一提的是，《中外物理学精品书系》还对中国近现代物理学科的经典著作进行了全面收录。20世纪以来，中国物理界诞生了很多经典作品，但当时大都分散出版，如今很多代表性的作品已经淹没在浩瀚的图书海洋中，读者们对这些论著也都是“只闻其声，未见其真”。该书系的编者们在这方面下了很大工夫，对中国物理学科不同时期、不同分支的经典著作进行了系统的整理和收录。这项工作具有非常重要的学术意义和社会价值，不仅可以很好地保护和传承我国物理学的经典文献，充分发挥其应有的传世育人的作用，更能使广大物理学人和青年学子切身体会我国物理学研究的发展脉络和优良传统，真正领悟到老一辈科学家严谨求实、追求卓越、博大精深的治学之美。

温家宝总理在2006年中国科学技术大会上指出，“加强基础研究是提升国家创新能力、积累智力资本的重要途径，是我国跻身世界科技强国的必要条件”。中国的发展在于创新，而基础研究正是一切创新的根本和源泉。我相信，这套《中外物理学精品书系》的出版，不仅可以使所有热爱和研究物理学的人们从中获取思维的启迪、智力的挑战和阅读的乐趣，也将进一步推动其他相关基础科学更好更快地发展，为我国今后的科技创新和社会进步做出应有的贡献。

《中外物理学精品书系》编委会 主任

中国科学院院士，北京大学教授

王恩哥

2010年5月于燕园

内 容 简 介

这是一本与通行的物理学教科书籍略有不同的书，叙述了相对论物理学的基本原理，不多涉及具体应用方面的内容. 主要的不同之处有以下几个方面：

1. 所用的数学方法不同. 除了通常的微分积分外，还应用了四元数的代数运算.

2. 以时间和空间具有同等地位，以及时间和空间构成的四维空间——时空的认识为前提，导出了不同惯性参考系之间的洛伦兹变换，使得所谓的光速不变原理成为时和空度量单位之间的换算常数不随惯性参考系而改变的必然推论.

3. 用时空中每一维的距离随时空中四维间隔的变化规律来描述相对论力学.

4. 用四元数电磁场的四梯度与四元数电磁源成正比的规律来描述电磁理论.

5. 用四元数对相对论性的能量动量关系进行因式分解，建立了不同种类的波动方程，用以描述不同种类的微观粒子的运动规律，叙述了对克莱因-戈尔登方程，以及对轨道角动量和自旋的不同认识.

一方面，由于笔者学术水平较低，知识领域狭窄，因此如量子场论、广义相对论等更深层次的物理内容没能涉及，实为遗憾.

另一方面，因为用四元数来描述物理理论的资料也未多见，此文只属尝试之举，故缺点错误在所难免，理所当然地欢迎批评指正，如能深入探讨和进一步发展更是所期盼的.

目　录

第 1 章　四元数代数

§1.1　四元数的代数运算

一、四元数的定义

一个三维空间的实矢量

$$\boldsymbol{a} = a_1\boldsymbol{i} + a_2\boldsymbol{j} + a_3\boldsymbol{k} \tag{1.1.1}$$

与一个实数 a_0 组合成一个数

$$A = a_0 + \boldsymbol{a} \tag{1.1.2}$$

称为**四元数**. 其中实数 a_0 称为四元数 A 的**标部**,实矢量 $\boldsymbol{a}$ 称为四元数 A 的**矢部**. 分别用下标 S 和 V 表示标部和矢部,记作

$$\begin{cases} A_\mathrm{S} = a_0, \\ A_\mathrm{V} = \boldsymbol{a}. \end{cases} \tag{1.1.3}$$

在四元数 A 的矢部中,三个矢量 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 是三维空间中三个互相垂直且方向固定的单位矢量.

一个四元数实际上是由四个基 $1,\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 的线性组合构成的.

二、代数运算法则

1. *相等*

两个四元数 A 和 B,若他们相应的四个分量分别相等,即

$$a_n = b_n, \quad n = 0,1,2,3.$$

则称他们**相等**,记作

$$A = B. \tag{1.1.4}$$

一个四元数的等式相当于四个实数等式.

2. *加法*

两个四元数 A 和 B 之和 C 仍为四元数,记作

$$C = A + B. \tag{1.1.5}$$

其定义为

$$c_n = a_n + b_n, \quad n = 0,1,2,3.$$

由实数加法的交换律、结合律知，四元数加法也存在着交换律和结合律.

3. 乘法

两个四元数 A 和 B 乘积的定义是

$$AB = (a_0 + \boldsymbol{a})(b_0 + \boldsymbol{b}) = a_0 b_0 - \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + a_0 \boldsymbol{b} + b_0 \boldsymbol{a} + \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}, \tag{1.1.6a}$$

$$BA = (b_0 + \boldsymbol{b})(a_0 + \boldsymbol{a}) = a_0 b_0 - \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + a_0 \boldsymbol{b} + b_0 \boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{a}. \tag{1.1.6b}$$

两个四元数的乘积仍是四元数，但因为

$$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{a},$$

故

$$AB \neq BA.$$

所以，一般来说四元数的乘法不存在交换律.

有一种特殊情形：若两个四元数 A 和 B 的矢部平行，即 $\boldsymbol{a} /\!/ \boldsymbol{b}$，那么由于

$$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{a} = 0,$$

则有

$$AB = BA.$$

所以两个矢部平行的四元数相乘时是满足交换律的.

由四元数乘法的定义(1.1.6)式易证，四元数的乘法仍存在结合律和分配律.当相乘的两个四元数的标部均为 0 时，其乘积

$$AB = \boldsymbol{ab} = -\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$$

仍是四元数.写法 $\boldsymbol{ab}$ 不是张量代数中的并矢，而是两个特殊四元数之积，是一个四元数.

四元数的乘法规则实际上是由三个互相垂直的空间单位矢量 $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ 之间的乘法规则

$$\begin{cases} \boldsymbol{ii} = \boldsymbol{jj} = \boldsymbol{kk} = -1, \\ \boldsymbol{ij} = -\boldsymbol{ji} = \boldsymbol{k}, \\ \boldsymbol{jk} = -\boldsymbol{kj} = \boldsymbol{i}, \\ \boldsymbol{ki} = -\boldsymbol{ik} = \boldsymbol{j} \end{cases} \tag{1.1.7}$$

所导致的.

4. 共轭和模方

(1) 四元共轭：与四元数 $A = a_0 + \boldsymbol{a}$ 对应的另一个四元数

$$\widetilde{A} = a_0 - \boldsymbol{a} \tag{1.1.8}$$

称为 A 的**四元共轭**.反之，A 也称为 $\widetilde{A}$ 的**四元共轭**.

由

$$\widetilde{AB}=a_0b_0-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}-a_0\boldsymbol{b}-b_0\boldsymbol{a}-\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b},$$

$$\begin{aligned}\widetilde{B}\widetilde{A}&=(b_0-\boldsymbol{b})(a_0-\boldsymbol{a})\\&=a_0b_0-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}-a_0\boldsymbol{b}-b_0\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{a}\end{aligned}$$

可知

$$\widetilde{AB}=\widetilde{B}\widetilde{A}. \tag{1.1.9}$$

(2) 模方:称实数

$$\|A\|=\|\widetilde{A}\|=A\widetilde{A}=\widetilde{A}A=a_0^2+\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} \tag{1.1.10}$$

为四元数 A 或 $\widetilde{A}$ 的**模方**.

由简单的运算可知,两个四元数之积的模方等于两个四元数模方之积,即

$$\|AB\|=\|A\|\ \|B\|. \tag{1.1.11}$$

5. 逆

若四元数 A 的模方不为 0,则称四元数

$$A^{-1}=\frac{\widetilde{A}}{\|A\|} \tag{1.1.12}$$

为 A 的**逆**. 显然有

$$AA^{-1}=A^{-1}A=1,$$

$$\|A^{-1}\|=\frac{\widetilde{A}}{\|A\|}\frac{A}{\|A\|}=\frac{1}{\|A\|}.$$

且因

$$\frac{\widetilde{AB}}{\|AB\|}=\frac{\widetilde{B}\widetilde{A}}{\|B\|\ \|A\|},$$

故

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}. \tag{1.1.13}$$

6. 关于除法

在四元数的算法中没有定义除法. 不过,如果四元数 A 的模方 $\|A\|\neq 0$,那么仍可借用 $\frac{A}{A}=1$ 的形式,得出

$$BA^{-1}=BA^{-1}\frac{A}{A}=B\frac{1}{A},$$

$$A^{-1}B=\frac{A}{A}A^{-1}B=\frac{1}{A}B.$$

上面二式可理解成 B 用四元数 A 来除. 只是一般情况下"左除"还是"右除"的结果

并不相同,所以四元数算法中不用除法,在需要的时候则以乘其逆来代替.

三、四元数的指数表示

用无穷级数

$$\mathrm{e}^{\alpha \boldsymbol{e}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \boldsymbol{e})^n}{n!} \tag{1.1.14}$$

作为四元数指数函数的定义,其中 α 是实数,$\boldsymbol{e}$ 是四元数 $\mathrm{e}^{\alpha \boldsymbol{e}}$ 矢部的单位矢量. 由四元数乘法

$$\boldsymbol{e}^2 = -1, \quad \boldsymbol{e}^3 = -\boldsymbol{e}, \quad \boldsymbol{e}^4 = 1$$

得

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\alpha \boldsymbol{e}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \alpha^{2n}}{(2n)!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \alpha^{2n+1}}{(2n+1)!} \boldsymbol{e} \\
&= \cos\alpha + \sin\alpha \boldsymbol{e}.
\end{aligned} \tag{1.1.15}$$

所以四元数可以表示成指数的形式

$$A = a_0 + \boldsymbol{a} = |A| \mathrm{e}^{\alpha \boldsymbol{e}}, \tag{1.1.16}$$

其中

$$\begin{cases}
\boldsymbol{e} = \dfrac{\boldsymbol{a}}{a}, \\
a_0 = |A| \cos\alpha, \\
a = |A| \sin\alpha,
\end{cases}$$

$|A|$ 称为四元数 A 的模,有

$$\begin{cases}
\alpha = \arctan \dfrac{a}{a_0}, \\
|A| = \sqrt{a_0^2 + a^2} = \sqrt{\|A\|}.
\end{cases} \tag{1.1.17}$$

所以

$$A = a_0 + \boldsymbol{a} = \sqrt{\|A\|} \mathrm{e}^{\left(\arctan \frac{a}{a_0}\right) \frac{\boldsymbol{a}}{a}}.$$

当两个四元数 A 和 B 的矢部平行,即 $\boldsymbol{a} /\!/ \boldsymbol{b}$ 时,

$$A = \sqrt{\|A\|} \mathrm{e}^{\alpha_1 \boldsymbol{e}}, \quad B = \sqrt{\|B\|} \mathrm{e}^{\alpha_2 \boldsymbol{e}}.$$

则

$$\begin{aligned}
AB = BA &= a_0 b_0 - ab + (a_0 b + b_0 a) \boldsymbol{e} \\
&= \sqrt{\|A\| \, \|B\|} \mathrm{e}^{(\alpha_1 + \alpha_2) \boldsymbol{e}}.
\end{aligned}$$

如果两个四元数 A 和 B 的矢部不平行,则因为

$$\mathrm{e}^{\alpha_1 \boldsymbol{e}_1} \mathrm{e}^{\alpha_2 \boldsymbol{e}_2} \neq \mathrm{e}^{\alpha_2 \boldsymbol{e}_2} \mathrm{e}^{\alpha_1 \boldsymbol{e}_1}.$$

所以,一般来说四元数的乘法并不能用指数的加法来简化,其原因是四元数的加法

满足交换律,而乘法并不满足交换律,因此四元数的指数表示法在四元数的算法中并不占重要地位,只在特殊情况下,如快度的计算中才应用.

§1.2 四元数在数中的地位

在数的发展历程中,经历了自然数、负数、整数、有理数、无理数,这些数总称为实数.一根数轴被实数充满.实数间的运算结果总保持在同一数轴上——称之为封闭性;除0以外的任一实数,总可用另一个实数与其相乘使其乘积历遍整个数轴——称之为完备性.因此实数的集合构成了一个代数,用实数之间的运算就能承担在一条直线上发生的物理事件.至于在另一条直线上发生的事件,则需要进行另一套实数运算来解决.

复数的诞生开创了数观念的新阶段,它使数从一条直线发展到了一个平面.复数的乘法规则既保持了它的封闭性,即两个复数的乘积仍然是复数;又保持了它的完备性,即给定了任一个非0复数后,总存在另外的复数与该复数相乘并使其乘积历遍整个复数平面.这样复数的集合也构成了一个代数,一个平面上发生的事件就总可通过复数间的运算来解决.

直线只是平面的特例,实数也只是复数的特例,于是实数之间的运算规则也只是复数之间运算规则的特例.因此,复数既是以实数为其基础,又是比实数高一层次的数的形态.

能不能把数的形态进一步发展至体,成为一个"三维数"? 人们在这方面作了极大的努力.

一方面,人们建立了三维矢量,用它来与三维空间的点一一对应,并且发展出了一套矢量之间的运算法则.但是这种矢量能否成为"三维数"呢? 问题在于怎样来规定矢量之间的乘法.两个矢量之间点乘的结果不再是矢量,而是一个数量,破坏了封闭性;两个矢量之间叉乘的结果虽仍是一个矢量,然而它总与相乘的两个矢量垂直,因此不可能在任意给定一个非0矢量后,用其他矢量与它叉乘使其积矢量历遍整个空间,所以破坏了完备性.至今,人们还没有找到一种矢量之间的乘法规则,使得矢量成为一个"三维数".

另一方面,哈密顿于1843年发现创造了四元数.上一节已经对四元数作了简单的介绍,说明了四元数的乘法既保持了它的封闭性,又保持了它的完备性,表明四元数的集合也构成了一个代数——四元数代数.四元数的乘法是集数与数的乘法、数与矢量的乘法、矢量间的点乘和叉乘于一身的乘法.

如果只讨论矢部均是同一方向的四元数,那么它们就蜕化成了复数,这时四元

数的乘法就蜕化成了复数的乘法，表明复数的代数只是四元数代数的子代数. 更进一步，若只讨论矢部为 0 的四元数，那么它们就蜕化成了实数. 实数代数既是复数代数的子代数，更是四元数代数的子代数. 所以，四元数是比实数、复数更高一层次的数的形态.

一个四维空间中点的位置可以与一个四元数一一对应，于是在四维空间中产生的种种现象及其演变的规律总可以借四元数来描述和运算，这就已经显现出了四元数的应用价值. 不仅如此，数的形态，从实数（一维）、复数（二维），越过了三维数而直接到达四元数的事实，可能已经提醒了人们，自然界在本质上就是四维的. 因此在自然界中发生的各种事件及其演变的规律性，本来就应该用四元数来表述和运算才是正确的方法，而其他的表述和运算很可能只是四元数表述和运算方法的特例、推论或者近似.

数的形态还可以进一步发展. 把两个四元数 A 和 B 再组起来成为一个数——八元数：

$$A+B\boldsymbol{e}.$$

其中 $\boldsymbol{e}$ 是独立于 $1,\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 之外的一个新的单位矢量，满足

$$\boldsymbol{e}^2=-1,\quad \boldsymbol{e}1=1\boldsymbol{e}=\boldsymbol{e},$$
$$\boldsymbol{ei}=-\boldsymbol{ie},\quad \boldsymbol{ej}=-\boldsymbol{je},$$
$$\boldsymbol{ek}=-\boldsymbol{ke}.$$

两个八元数之间的加法和乘法规定为

$$(A+B\boldsymbol{e})+(C+D\boldsymbol{e})=(A+C)+(B+D)\boldsymbol{e},$$
$$(A+B\boldsymbol{e})(C+D\boldsymbol{e})=(AC-\widetilde{D}B)+(DA+B\widetilde{C})\boldsymbol{e}.$$

八元数乘法既不满足交换律，也不满足结合律. 不过它却仍然具有封闭性和完备性，因此八元数的集合也构成一个代数——八元数代数，而四元数代数仅是八元数代数的一个子代数.

八元数的理论、八元数的几何意义及其在物理学中的应用可参阅有关文献，不属本书的讨论范畴.

§1.3　四元数的发展

四元数是数观念发展阶段上一个新的层次，在四维空间中发生的事情可以由它来描述和运算. 为了增强四元数的运算功能，拓广它的应用范围，还可以将四元数本身进一步地发展.

一、双四元数

在四元数

$$A = a_0 + a_1\boldsymbol{i} + a_2\boldsymbol{j} + a_3\boldsymbol{k} = a_0 + \boldsymbol{a} \tag{1.3.1}$$

中，如果 $a_n(n=0,1,2,3)$ 中有一个以上（含一个）是复数（或纯虚数），那么就称 A 为**双四元数**.

两个双四元数间的相等、相加和相乘，与两个（单）四元数间的相等、相加和相乘完全相同.一个双四元数的等式相当于八个实数的等式.

双四元数的集合构成了一个代数，而（单）四元数的代数则是双四元数代数的子代数.

对于一个双四元数 A，有五个双四元数与它相对应，或与它共轭，分别是

四元共轭：　$\widetilde{A}=a_0-a_1\boldsymbol{i}-a_2\boldsymbol{j}-a_3\boldsymbol{k}=a_0-\boldsymbol{a}$；　(1.3.2a)

反共轭：　$A^c=a_0^*+a_1^*\boldsymbol{i}+a_2^*\boldsymbol{j}+a_3^*\boldsymbol{k}=a_0^*+\boldsymbol{a}^*$；　(1.3.2b)

转置：　$A^{\mathrm{T}}=a_0+a_1\boldsymbol{i}-a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}$；　(1.3.2c)

复共轭：　$A^*=a_0^*-a_1^*\boldsymbol{i}+a_2^*\boldsymbol{j}-a_3^*\boldsymbol{k}$；　(1.3.2d)

厄米共轭：　$A^{\dagger}=a_0^*-a_1^*\boldsymbol{i}-a_2^*\boldsymbol{j}-a_3^*\boldsymbol{k}=a_0^*-\boldsymbol{a}^*$.　(1.3.2e)

容易验证

$$A^{\dagger} = (\widetilde{A})^c = \widetilde{A^c} = (A^{\mathrm{T}})^* = (A^*)^{\mathrm{T}}. \tag{1.3.3}$$

双四元数模方的定义与（单）四元数模方的定义相同，即

$$\|A\| = A\widetilde{A} = \widetilde{A}A = \sum_{n=0}^{3} a_n^2. \tag{1.3.4}$$

但在一般情况下它是复的.在一些特殊情况下它可能是实的，不过此时它也并非总是正的.

(1.3.2)式表明，双四元数 A 及其各种共轭的模方之间满足关系

$$\|A\| = \|\widetilde{A}\| = \|A^{\mathrm{T}}\| = \|A^c\|^* = \|A^*\|^* = \|A^{\dagger}\|^*. \tag{1.3.5}$$

两个双元数 A 和 B 的各种共轭之间的乘法的规律是

$$\begin{cases} A^cB^c = (AB)^c, \\ A^*B^* = (AB)^*, \\ \widetilde{A}\widetilde{B} = \widetilde{BA}, \\ A^{\mathrm{T}}B^{\mathrm{T}} = (BA)^{\mathrm{T}}, \\ A^{\dagger}B^{\dagger} = (BA)^{\dagger}. \end{cases} \tag{1.3.6}$$

在用四元数表述量子力学的规律时，微观粒子态函数的表述依赖于两个特殊的双四元数

$$\begin{cases} u = \dfrac{1}{2}(1 - \mathrm{i}\boldsymbol{i}), \\ v = -\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j} + \mathrm{i}\boldsymbol{k}). \end{cases} \tag{1.3.7a}$$

他们的四元共轭、反共轭、复共轭、转置和厄米共轭分别为

四元共轭：
$$\begin{cases} \tilde{u} = \dfrac{1}{2}(1 + \mathrm{i}\boldsymbol{i}), \\ \tilde{v} = \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j} + \mathrm{i}\boldsymbol{k}) = -v; \end{cases} \tag{1.3.7b}$$

反共轭：
$$\begin{cases} u^{\mathrm{c}} = \dfrac{1}{2}(1 + \mathrm{i}\boldsymbol{i}) = \tilde{u}, \\ v^{\mathrm{c}} = -\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j} - \mathrm{i}\boldsymbol{k}); \end{cases} \tag{1.3.7c}$$

复共轭：
$$\begin{cases} u^{*} = \dfrac{1}{2}(1 - \mathrm{i}\boldsymbol{i}) = u, \\ v^{*} = -\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j} + \mathrm{i}\boldsymbol{k}) = v; \end{cases} \tag{1.3.7d}$$

厄米共轭和转置：
$$\begin{cases} u^{\dagger} = u^{\mathrm{T}} = \dfrac{1}{2}(1 - \mathrm{i}\boldsymbol{i}) = u, \\ v^{\dagger} = v^{\mathrm{T}} = \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j} - \mathrm{i}\boldsymbol{k}) = -v^{\mathrm{c}}. \end{cases} \tag{1.3.7e}$$

他们有重要的运算性质：

$$\begin{cases} \boldsymbol{i}u = \mathrm{i}u, & \boldsymbol{j}u = -v, & \boldsymbol{k}u = \mathrm{i}v, \\ \boldsymbol{i}v = -\mathrm{i}v, & \boldsymbol{j}v = u, & \boldsymbol{k}v = \mathrm{i}u; \end{cases} \tag{1.3.8a}$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{i}u^{\mathrm{c}} = -\mathrm{i}u^{\mathrm{c}}, & \boldsymbol{j}u^{\mathrm{c}} = -v^{\mathrm{c}}, & \boldsymbol{k}u^{\mathrm{c}} = -\mathrm{i}v^{\mathrm{c}}, \\ \boldsymbol{i}v^{\mathrm{c}} = \mathrm{i}v^{\mathrm{c}}, & \boldsymbol{j}v^{\mathrm{c}} = u^{\mathrm{c}}, & \boldsymbol{k}v^{\mathrm{c}} = -\mathrm{i}u^{\mathrm{c}}. \end{cases} \tag{1.3.8b}$$

以及

$$\begin{cases} u^{\dagger}u = v^{\dagger}v = u, \\ u^{\dagger}v = v^{\dagger}u = 0. \end{cases} \tag{1.3.8c}$$

和

$$\begin{cases} u^{\mathrm{c}}v = v, \\ v^{\mathrm{c}}v = -u. \end{cases} \tag{1.3.8d}$$

这些运算性质在求解微观粒子的波动方程时会经常应用，例如对于四元形式的方程

$$A(\phi u + \psi v) = 0, \tag{1.3.9}$$

其中，A 是四元数形式的运算符号，ϕ 和 ψ 是标量函数. 把上式展开得

$$\begin{aligned} &(a_0 + a_1\boldsymbol{i} + a_2\boldsymbol{j} + a_3\boldsymbol{k})(\phi u + \psi v) \\ &\quad = [(a_0 + \mathrm{i}a_1)\phi + (a_2 + \mathrm{i}a_3)\psi]u + [(a_0 - \mathrm{i}a_1)\psi - (a_2 - \mathrm{i}a_3)\phi]v \\ &\quad = 0. \end{aligned}$$

于是,(1.3.9)式的分量方程则为

$$\begin{cases}(a_0+\mathrm{i}a_1)\phi+(a_2+\mathrm{i}a_3)\psi=0,\\(a_0-\mathrm{i}a_1)\psi-(a_2-\mathrm{i}a_3)\phi=0.\end{cases}\tag{1.3.10}$$

二、二级四元数

增强四元数运算功能的另一种方法是增高四元数的级别.

依照把四个实数或复数组合成一个四元数或双四元数的方法,把四个四元数或双四元数再组合成一个数

$$Q=A+B\boldsymbol{i}_2+C\boldsymbol{j}_2+D\boldsymbol{k}_2,\tag{1.3.11}$$

称它为**二级四元数或二级双四元数**.其中,A,B,C 和 D 是四元数或双四元数,$\boldsymbol{i}_2$,$\boldsymbol{j}_2$,$\boldsymbol{k}_2$ 是二级单位矢量,他们的运算性质与一级单位矢量 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 完全相同,即

$$\begin{cases}\boldsymbol{i}_2\boldsymbol{i}_2=\boldsymbol{j}_2\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{k}_2=-1,\\\boldsymbol{i}_2\boldsymbol{j}_2=-\boldsymbol{j}_2\boldsymbol{i}_2=\boldsymbol{k}_2,\\\boldsymbol{j}_2\boldsymbol{k}_2=-\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{i}_2,\\\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{i}_2=-\boldsymbol{i}_2\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{j}_2.\end{cases}\tag{1.3.12}$$

当二级单位矢量与一级单位矢量放在一起"相加"或"相乘"时,并不发生运算,其前后的次序可以调换.例如

$$\begin{cases}\boldsymbol{i}+\boldsymbol{i}_2=\boldsymbol{i}_2+\boldsymbol{i},\\\boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2=\boldsymbol{i}_2\boldsymbol{i}\end{cases}\tag{1.3.13}$$

等等.

二级四元数的加法为

$$\begin{aligned}&(A_1+B_1\boldsymbol{i}_2+C_1\boldsymbol{j}_2+D_1\boldsymbol{k}_2)+(A_2+B_2\boldsymbol{i}_2+C_2\boldsymbol{j}_2+D_2\boldsymbol{k}_2)\\&\quad=(A_1+A_2)+(B_1+B_2)\boldsymbol{i}_2+(C_1+C_2)\boldsymbol{j}_2+(D_1+D_2)\boldsymbol{k}_2,\end{aligned}\tag{1.3.14}$$

乘法为

$$\begin{aligned}&(A_1+B_1\boldsymbol{i}_2+C_1\boldsymbol{j}_2+D_1\boldsymbol{k}_2)(A_2+B_2\boldsymbol{i}_2+C_2\boldsymbol{j}_2+D_2\boldsymbol{k}_2)\\&\quad=(A_1A_2-B_1B_2-C_1C_2-D_1D_2)+(A_1B_2+B_1A_2+C_1D_2-D_1C_2)\boldsymbol{i}_2\\&\qquad+(A_1C_2+C_1A_2+D_1B_2-B_1D_2)\boldsymbol{j}_2+(A_1D_2+D_1A_2+B_1C_2-C_1B_2)\boldsymbol{k}_2.\end{aligned}\tag{1.3.15}$$

因此,一级四元数的集合是二级四元数集合的子集,一级四元数代数是二级四元数代数的子代数.

假若在构成二级四元数(1.3.11)式的四个四元数中有一个以上是双四元数,那么就称其为二级双四元数.

与双四元数一样,一个二级双四元数也对应着多个与它共轭的二级双四元数.

四元共轭：　$\widetilde{Q}=\widetilde{A}-\widetilde{B}\boldsymbol{i}_2-\widetilde{C}\boldsymbol{j}_2-\widetilde{D}\boldsymbol{k}_2$；　(1.3.16a)

反共轭：　$Q^c=A^c+B^c\boldsymbol{i}_2+C^c\boldsymbol{j}_2+D^c\boldsymbol{k}_2$；　(1.3.16b)

转置：　$Q^T=A^T+B^T\boldsymbol{i}_2-C^T\boldsymbol{j}_2+D^T\boldsymbol{k}_2$；　(1.3.16c)

复共轭：　$Q^*=A^*-B^*\boldsymbol{i}_2+C^*\boldsymbol{j}_2-D^*\boldsymbol{k}_2$；　(1.3.16d)

厄米共轭：　$Q^\dagger=A^\dagger-B^\dagger\boldsymbol{i}_2-C^\dagger\boldsymbol{j}_2-D^\dagger\boldsymbol{k}_2$.　(1.3.16e)

二级四元数 Q 的逆 Q^{-1} 的性质是

$$QQ^{-1}=Q^{-1}Q=1, \tag{1.3.17}$$

而其模方的定义由下一节给出.

与四元数的情形类似，二级双四元数也有

$$Q^\dagger=(\widetilde{Q})^c=\widetilde{Q}^c=(Q^T)^*=(Q^*)^T. \tag{1.3.18}$$

在二级双四元数中有四个特殊的二级双四元数，u_1u_2，v_1u_2，u_1v_2，v_1v_2，它们在量子理论中用来描述微观粒子的状态时是必需的. 其中

$$\begin{cases} u_1=\dfrac{1}{2}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}), \quad u_2=\dfrac{1}{2}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2), \\ v_1=-\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j}+\mathrm{i}\boldsymbol{k}), \quad v_2=-\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{j}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2). \end{cases} \tag{1.3.19}$$

与它们相对应的各种共轭二级双四元数分别为

四元共轭：

$$\begin{cases} \widetilde{u_1u_2}=\dfrac{1}{4}(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i})(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2)=\tilde{u}_1\tilde{u}_2, \\ \widetilde{v_1u_2}=\dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}+\mathrm{i}\boldsymbol{k})(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2)=-v_1\tilde{u}_2, \\ \widetilde{u_1v_2}=\dfrac{1}{4}(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i})(\boldsymbol{j}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2)=-\tilde{u}_1v_2, \\ \widetilde{v_1v_2}=\dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}+\mathrm{i}\boldsymbol{k})(\boldsymbol{j}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2)=v_1v_2; \end{cases} \tag{1.3.20a}$$

反共轭：

$$\begin{cases} (u_1u_2)^c=\dfrac{1}{4}(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i})(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2)=u_1^cu_2^c, \\ (v_1u_2)^c=-\dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\boldsymbol{k})(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2)=v_1^cu_2^c, \\ (u_1v_2)^c=-\dfrac{1}{4}(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i})(\boldsymbol{j}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2)=u_1^cv_2^c, \\ (v_1v_2)^c=\dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\boldsymbol{k})(\boldsymbol{j}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2)=v_1^cv_2^c; \end{cases} \tag{1.3.20b}$$

复共轭：

$$\begin{cases}(u_1u_2)^* = \dfrac{1}{4}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i})(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2) = u_1u_2,\\ (v_1u_2)^* = -\dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}+\mathrm{i}\boldsymbol{k})(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2) = v_1u_2,\\ (u_1v_2)^* = -\dfrac{1}{4}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i})(\boldsymbol{j}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2) = u_1v_2,\\ (v_1v_2)^* = \dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}+\mathrm{i}\boldsymbol{k})(\boldsymbol{j}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2) = v_1v_2.\end{cases} \tag{1.3.20c}$$

它们的转置及厄米共轭则完全相同，为

$$\begin{cases}(u_1u_2)^{\mathrm{T}} = (u_1u_2)^\dagger = \dfrac{1}{4}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i})(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2),\\ (v_1u_2)^{\mathrm{T}} = (v_1u_2)^\dagger = \dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\boldsymbol{k})(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2),\\ (u_1v_2)^{\mathrm{T}} = (u_1v_2)^\dagger = \dfrac{1}{4}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i})(\boldsymbol{j}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2),\\ (v_1v_2)^{\mathrm{T}} = (v_1v_2)^\dagger = \dfrac{1}{4}(\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\boldsymbol{k})(\boldsymbol{j}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{k}_2).\end{cases} \tag{1.3.20d}$$

这些互相共轭的二级双四元数有一些重要的运算性质，下面列出常用的两个：

$$\begin{cases}(u_1u_2)^\dagger(u_1u_2) = (v_1u_2)^\dagger(v_1u_2)\\ \quad = (u_1v_2)^\dagger(u_1v_2) = (v_1v_2)^\dagger(v_1v_2) = u_1u_2,\\ (u_1u_2)^\dagger(v_1u_2) = (u_1u_2)^\dagger(u_1v_2) = (u_1u_2)^\dagger(v_1v_2)\\ \quad = (v_1u_2)^\dagger(u_1u_2) = (v_1u_2)^\dagger(u_1v_2) = (v_1u_2)^\dagger(v_1v_2)\\ \quad = (u_1v_2)^\dagger(u_1u_2) = (u_1v_2)^\dagger(v_1u_2) = (u_1v_2)^\dagger(v_1v_2)\\ \quad = (v_1v_2)^\dagger(u_1u_2) = (v_1v_2)^\dagger(v_1u_2) = (v_1v_2)^\dagger(u_1v_2) = 0.\end{cases} \tag{1.3.21a}$$

和

$$\begin{cases}(u_1u_2)^c(v_1v_2) = v_1v_2,\\ (v_1u_2)^c(v_1v_2) = -u_1v_2,\\ (u_1v_2)^c(v_1v_2) = -v_1u_2,\\ (v_1v_2)^c(v_1v_2) = u_1u_2.\end{cases} \tag{1.3.21b}$$

三、高级四元数

仿照把四个四元数组合成一个二级四元数的方法，还可以把四个二级四元数 Q_0, Q_1, Q_2, Q_3 组合成一个数

$$Q_0 + Q_1\boldsymbol{i}_3 + Q_2\boldsymbol{j}_3 + Q_3\boldsymbol{k}_3, \tag{1.3.22}$$

称为三级四元数. 其中 $\boldsymbol{i}_3, \boldsymbol{j}_3, \boldsymbol{k}_3$ 是三级单位矢量,它们的运算性质与一级、二级单位矢量完全相同.

继续这一过程,能够构造出更高级别的四元数,从而能增强四元数的运算功能,进一步拓广四元数的应用前景.

§1.4 四元数的矩阵表示

四元数与矩阵有着紧密的关系. 四元数可以用一些特殊的方阵来表示,而那些特殊的方阵也可以用四元数来表示. 因此可以说四元数只不过是一些特殊矩阵的另一种书写方法而已,所以从数学运算角度来说,四元数观念的出现并没有超越矩阵运算的观念. 然而,四元数因其写法简洁,致使其因式分解时比较方便,这在微观粒子波动方程的建立中起了重要的作用. 而且反共轭四元数的定义也是矩阵代数中不曾有过的,使得在粒子物理中对于反粒子有了数学描述的手段.

一、一级四元数与 2×2 矩阵

把四元数的四个基 $1, \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ 分别用四个 2×2 矩阵表示成

$$1=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{i}=\begin{bmatrix}\mathrm{i}&0\\0&-\mathrm{i}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{j}=\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{k}=\begin{bmatrix}0&\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}. \tag{1.4.1}$$

这样,一个四元数就可以用一个 2×2 的复矩阵表示成

$$A=a_0+\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_0+\mathrm{i}a_1 & a_2+\mathrm{i}a_3\\-a_2+\mathrm{i}a_3 & a_0-\mathrm{i}a_1\end{bmatrix}. \tag{1.4.2}$$

对于四元数,$a_n(n=0,1,2,3)$都是实数,因此它就等价于由两个复数 $a_0+\mathrm{i}a_1$ 和 $a_2+\mathrm{i}a_3$ 及其共轭复数 $a_0-\mathrm{i}a_1$ 和 $a_2-\mathrm{i}a_3$ 构成的一个特殊的 2×2 复矩阵.

对于双四元数,$a_n(n=0,1,2,3)$中至少有一个是复(或纯虚)的,那么它就等价于一个由四个复数构成的普遍的 2×2 复矩阵. 所以要普遍地应用 2×2 复矩阵时,只研究四元数是不够的,必须研究双四元数. 双四元数(1.4.2)的各种共轭的表示矩阵分别为

四元共轭:

$$\widetilde{A}=a_0-a_1\boldsymbol{i}-a_2\boldsymbol{j}-a_3\boldsymbol{k}=\begin{bmatrix}a_0-\mathrm{i}a_1 & -a_2-\mathrm{i}a_3\\a_2-\mathrm{i}a_3 & a_0+\mathrm{i}a_1\end{bmatrix}; \tag{1.4.3a}$$

反共轭:

$$A^{c}=a_0^*+a_1^*\boldsymbol{i}+a_2^*\boldsymbol{j}+a_3^*\boldsymbol{k}=\begin{bmatrix}a_0^*+\mathrm{i}a_1^* & a_2^*+\mathrm{i}a_3^*\\-a_2^*+\mathrm{i}a_3^* & a_0^*-\mathrm{i}a_1^*\end{bmatrix}; \tag{1.4.3b}$$

转置：

$$A^{\mathrm{T}} = a_0 + a_1 \boldsymbol{i} - a_2 \boldsymbol{j} + a_3 \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} a_0 + \mathrm{i}a_1 & -a_2 + \mathrm{i}a_3 \\ a_2 + \mathrm{i}a_3 & a_0 - \mathrm{i}a_1 \end{bmatrix}; \tag{1.4.3c}$$

复共轭：

$$A^{*} = a_0^{*} - a_1^{*} \boldsymbol{i} + a_2^{*} \boldsymbol{j} - a_3^{*} \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} a_0^{*} - \mathrm{i}a_1^{*} & a_2^{*} - \mathrm{i}a_3^{*} \\ -a_2^{*} - \mathrm{i}a_3^{*} & a_0^{*} + \mathrm{i}a_1^{*} \end{bmatrix}; \tag{1.4.3d}$$

厄米共轭：

$$A^{\dagger} = a_0^{*} - a_1^{*} \boldsymbol{i} - a_2^{*} \boldsymbol{j} - a_3^{*} \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} a_0^{*} - \mathrm{i}a_1^{*} & -a_2^{*} - \mathrm{i}a_3^{*} \\ a_2^{*} - \mathrm{i}a_3^{*} & a_0^{*} + \mathrm{i}a_1^{*} \end{bmatrix}. \tag{1.4.3e}$$

四元数的模方也就是它的表示矩阵的行列式，即

$$\| A \| = \det A. \tag{1.4.4}$$

上述讨论表明，四元数的转置就是它的表示矩阵的转置矩阵；四元数的复共轭就是它的表示矩阵的复共轭阵；四元数的厄米共轭就是它的表示矩阵的厄米共轭矩阵. 而四元数的四元共轭则与它的表示矩阵的逆阵有关，即

$$\widetilde{A} = (\det A) A^{-1}. \tag{1.4.5}$$

至于两个特殊的双四元数 $u = \frac{1}{2}(1 - \mathrm{i}\boldsymbol{i})$ 和 $v = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{j} + \mathrm{i}\boldsymbol{k})$，以及它们相应的各种共轭的表示矩阵分别是

$$\begin{cases} u^{\dagger} = u^{*} = u^{\mathrm{T}} = u = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ v^{*} = -\tilde{v} = v = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\ v^{\dagger} = -v^{\mathrm{c}} = v^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ u^{\mathrm{c}} = \tilde{u} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{cases} \tag{1.4.6}$$

用(1.4.6)式去验证(1.3.8)式是非常明显的.

二、二级双四元数与 4×4 矩阵

四元数可以用 2×2 矩阵表示((1.4.1)式)，类似地，二级四元数可以用 4×4 矩阵表示. 其四个基 $1, \boldsymbol{i}_2, \boldsymbol{j}_2, \boldsymbol{k}_2$ 表示成

$$1 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{i}_2 = \begin{bmatrix} \mathrm{i}I_2 & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}I_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{j}_2 = \begin{bmatrix} 0 & I_2 \\ -I_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{k}_2 = \begin{bmatrix} 0 & \mathrm{i}I_2 \\ \mathrm{i}I_2 & 0 \end{bmatrix}. \tag{1.4.7}$$

其中 I_2 是 2×2 的单位矩阵. 这样,一个二级四元数的矩阵表示为

$$
\begin{aligned}
Q &= A + B\boldsymbol{i}_2 + C\boldsymbol{j}_2 + D\boldsymbol{k}_2 \\
&= \begin{bmatrix} A+\mathrm{i}B & C+\mathrm{i}D \\ -C+\mathrm{i}D & A-\mathrm{i}B \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}
a_0-b_1+\mathrm{i}(a_1+b_0) & a_2-b_3+\mathrm{i}(a_3+b_2) & c_0-d_1+\mathrm{i}(c_1+d_0) & c_2-d_3+\mathrm{i}(c_3+d_2) \\
-(a_2+b_3)+\mathrm{i}(a_3-b_2) & a_0+b_1-\mathrm{i}(a_1-b_0) & -(c_2+d_3)+\mathrm{i}(c_3-d_2) & c_0+d_1-\mathrm{i}(c_1-d_0) \\
-(c_0+d_1)-\mathrm{i}(c_1-d_0) & -(c_2+d_3)-\mathrm{i}(c_3-d_2) & a_0+b_1+\mathrm{i}(a_1-b_0) & a_2+b_3+\mathrm{i}(a_3-b_2) \\
c_2-d_3-\mathrm{i}(c_3+d_2) & -(c_0-d_1)+\mathrm{i}(c_1+d_0) & -(a_2-b_3)+\mathrm{i}(a_3+b_2) & a_0-b_1-\mathrm{i}(a_1+b_0)
\end{bmatrix}.
\end{aligned}
\tag{1.4.8}
$$

二级四元数的模方由该四元数的表示矩阵的行列式来定义:

$$
\|Q\| = \det Q. \tag{1.4.9}
$$

二级四元数 Q 的各种共轭的表示矩阵不再一一列出. 下面仅把四个特殊的二级双四元数及其复共轭和反共轭用矩阵表示出来:

$$
\begin{cases}
u_1u_2 = (u_1u_2)^* = \begin{bmatrix} 1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0 \end{bmatrix}, \quad (u_1u_2)^c = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&1 \end{bmatrix}; \\
v_1u_2 = (v_1u_2)^* = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0 \end{bmatrix}, \quad (v_1u_2)^c = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&-1\\0&0&0&0 \end{bmatrix}; \\
u_1v_2 = (u_1v_2)^* = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&0 \end{bmatrix}, \quad (u_1v_2)^c = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&-1\\0&0&0&0\\0&0&0&0 \end{bmatrix}; \\
v_1v_2 = (v_1v_2)^* = \begin{bmatrix} 0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\1&0&0&0 \end{bmatrix}, \quad (v_1v_2)^c = \begin{bmatrix} 0&0&0&1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0 \end{bmatrix}.
\end{cases}
\tag{1.4.10}
$$

结合(1.3.21b)式就可以把只有第 4 列的单列矩阵转换到只有第 1 列的单列矩阵,这在粒子的状态描述中是有用的.

三、高级四元数与高阶方阵

三级四元数可以用 8×8 阶矩阵来表示,它的四个基分别为

$$1=\begin{bmatrix}I_4 & 0\\ 0 & I_4\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{i}_3=\begin{bmatrix}\mathrm{i}I_4 & 0\\ 0 & -\mathrm{i}I_4\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{j}_3=\begin{bmatrix}0 & I_4\\ -I_4 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{k}_3=\begin{bmatrix}0 & \mathrm{i}I_4\\ \mathrm{i}I_4 & 0\end{bmatrix}. \tag{1.4.11}$$

其中 I_4 是 4×4 单位矩阵.这样,三级四元数(1.3.22)式就表示成了

$$Q_0+Q_1\boldsymbol{i}_3+Q_2\boldsymbol{j}_3+Q_3\boldsymbol{k}_3=\begin{bmatrix}Q_0+\mathrm{i}Q_1 & Q_2+\mathrm{i}Q_3\\ -Q_2+\mathrm{i}Q_3 & Q_0-\mathrm{i}Q_1\end{bmatrix}. \tag{1.4.12}$$

它的各种共轭不再列出,只在需要应用的地方再讨论.

循此思路,更高级别的四元数则可与更高阶的方阵相对应.普遍地为

$$\begin{aligned}1&=\begin{bmatrix}I_{2^{n-1}} & 0\\ 0 & I_{2^{n-1}}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{i}_n=\begin{bmatrix}\mathrm{i}I_{2^{n-1}} & 0\\ 0 & -\mathrm{i}I_{2^{n-1}}\end{bmatrix},\\ \boldsymbol{j}_n&=\begin{bmatrix}0 & I_{2^{n-1}}\\ -I_{2^{n-1}} & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{k}_n=\begin{bmatrix}0 & \mathrm{i}I_{2^{n-1}}\\ \mathrm{i}I_{2^{n-1}} & 0\end{bmatrix}.\end{aligned} \tag{1.4.13}$$

其中 $I_{2^{n-1}}$ 是 $2^{n-1}\times 2^{n-1}$ 的单位矩阵,所以 n 级四元数与 $2^n\times 2^n$ 阶方阵相对应.

四元数和它的表示矩阵之间是一一对应的关系,因此它们是互为表示.四元数从数的观念上来说是实数和复数后的一个新的层次,但与矩阵代数相比它又有明显的不足:仅讨论一些特殊方阵之间的运算.

不过四元数的运算规则实际上是突出了矩阵的分块运算法则,有利于物理规律的描述.各种共轭四元数,尤其是反共轭的定义,这在矩阵数学中不曾有过,或者说是被忽略了的,它为反粒子世界的规律提供了数学描述的手段.

第2章　狭义相对论时空观

§2.1　时　　空

任何一个事件，总是发生在某一个时刻，发生在某一个地点，这是人所共知的事情.然而对于时间和空间本身的正确认识，人们却经历了一个漫长的过程.

长期以来，人们习以为常的信念是，时间就是时间，空间就是空间，他们根本是两个不同的概念.时间像一条长河，在均匀地、不断地流淌着.时间是一维的，只要取定了一个起始点，那么过去、现在和未来，任何一个时刻都可以定量地表示出来了.而空间是三维的，需要建立一个三维的空间坐标架，才能把空间中任何一个地点的位置定量地表示出来.

当人们想要考察一个物体是静还是动，以及怎样运动的情况时，首先意识到需要取定一个参照物(称为参考系)，然后将该物体与这个参照物固连在一起，建立一个三维的空间坐标架，记录下该物体的空间位置随着时间的变化情况，这样人们才得以知道物体的运动规律.可是这个人们借以考察物体运动情况的参照物又该怎样来选取呢？人们在力学的研究中发现，存在着一类互相做匀速直线运动的参考系，在这类参考系中，力学规律的表述形式是相同的，并不因参考系的改变而改变.这一类参考系称为惯性参考系，而力学定律的表述形式在所有的惯性参考系中都相同，这个规律被称为力学的相对性原理.力学的相对性原理表明，物体的所谓静与动本质上就是相对的，总是相对于所选择的参考系而言的.

然而一直到19世纪末，人们仍然有着这样一个牢固的观念:物体是静还是动，“客观”上应该是确定了的.这一观念是如此根深蒂固，以至于对静或动是相对的这种看法难以置信，对于认为所有的惯性参考系的地位平等的看法不予置信.

人们相信，在所有的惯性参考系中存在着一个特殊的参考系，相对于这个参考系，应该可以绝对地判定物体究竟是静还是动，这个特殊的惯性参考系被称为绝对静止参考系.

人们在研究电磁现象时发现，产生电磁场场源的大小是与电荷的运动速度有关的，而速度则显然与所选择的参考系有关，于是认为电磁规律的表述形式与参考系有关.不同惯性参考系的地位并不平等的看法似乎得到了验证，而已经总结出来的电磁规律的形式正好是相对于绝对静止参考系才成立的.以上这种对时间和空

间的看法被后人称作绝对时空观.

在绝对时空观念的指导下,可以推导出在两个不同的惯性参考系之间时空位置之间的变换关系.

有两个惯性参考系 S 和 S',两者取同一个时间的起始点,且各自取一个坐标架,使两者的坐标轴互相平行,初始时刻两者的原点互相重合. 相对于 S 系,S'系以速度 $\boldsymbol{u}$ 运动. 由于时间和空间是不同的概念,时间的进程“显然”就和空间坐标无关;而空间坐标在不同的参考系中则不相同,其间的关系是

$$\begin{cases} t' = t, \\ r'_{/\!/} = r_{/\!/} - ut, \\ r'_{\perp} = r_{\perp}. \end{cases} \tag{2.1.1}$$

其中,$r_{/\!/}$ 和 $r_{\perp}$ 分别表示沿着 $\boldsymbol{u}$ 的方向和垂直于 $\boldsymbol{u}$ 的方向的空间位置. 这个从绝对时空观所导致的两个惯性参考系之间的坐标变换关系称为伽利略变换.

伽利略变换的性质是,在不同的惯性参考系中,一个延续性的事件所经历的时间是相同的:

$$\mathrm{d}t' = \mathrm{d}t. \tag{2.1.2a}$$

空间两个点之间的距离是相同的:

$$\sqrt{(x'_2 - x'_1)^2 + (y'_2 - y'_1)^2 + (z'_2 - z'_1)^2} = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}. \tag{2.1.2b}$$

而质点的速度则与参考系有关,为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{u}. \tag{2.1.2c}$$

也就是速度的平行四边形加法规则.

在绝对时空观中,正因为时间和空间是两个绝对无关的概念,因此人们自然地要采用两种度量它们的单位,时间用秒,而空间则用米.

在绝对时空观念下,人们合乎逻辑地希望知道人类赖以生存的地球相对于绝对静止参考系是怎样运动的,借此希望对这种绝对静止参考系有所了解. 为了测量地球相对于绝对静止参考系的运动,迈克尔孙精心地研制了一种光的干涉仪,并与莫雷一道创造性地设计了一个能够精确地测量地球相对于绝对静止参考系运动情况的实验. 然而实验测量的结果却大大出乎了当时人们的预料,发现地球相对于绝对静止参考系根本不存在运动(当然是在一定的精度范围内). 也就是说地球本身就是一个绝对静止参考系. 这个结论当然不能为人们所接受.

面对着迈克尔孙-莫雷实验结果这个客观事实,人们一时有些彷徨,有些迷惑.“在物理学晴朗天空的远处出现了两朵乌云”(注:其中另一朵与黑体辐射有关),可能是大自然对人们的“捉弄”. 然而人类有着无穷无尽的认识能力和创造性,迈克尔

孙-莫雷实验的结果迫使人们来检讨自己对时间和空间的传统看法是否正确.

人们不得不反思两个问题:(1) 在所有惯性参考系中,为什么“绝对静止参考系”有着独特的地位? 这种独特的地位究竟是一种客观存在,还是人们想当然地赋予的? (2) 时间和空间两者绝对无关,这是客观事实,或者只不过是人们主观上的一种看法?

是爱因斯坦挣脱了时空方面传统观念的束缚,提出了时间和空间的全新观念. 首先,爱因斯坦从根本上彻底否定了有绝对静止参考系的存在,认为所有的惯性参考系的地位完全平等. 否定物体的动和静有绝对意义,认为静和动本身就是相对于某个参考系而言的,并认为相对性原理不仅存在于力学之中,而且存在于所有的物理学规律之中. 以上观念被称作普遍的相对性原理或爱因斯坦相对性原理;其次,他又提出了真空中光的速度相对于一切惯性参考系都是相同的观念,称作光速不变原理. 正是根据这两条基本原理,爱因斯坦创造了举世闻名的狭义相对论.

狭义相对论的时空观念是人们在认识客观世界历程中的一次质的飞跃,近百年来除了量子观念的诞生以外,人类认识上的其他发现还很少能与之相比拟. 时至今日,狭义相对论的正确性已毋庸赘述. 相对不同的惯性参考系,真空中的光速不变也是不争的事实. 然而光速不变原理不仅为当时人们旧的思想观念所排斥,而且至今仍然为大多数人们的日常生活经验所难容. 人们总有疑问,光只是一种具体物质,为什么它的速度对不同惯性参考系会不变? 为什么光的速度会成为一切物质可能达到的速度的极限?

本文在叙述狭义相对论的基本内容时,改变了基本原理的提法,直接从对时空的新观念上入手.

两条基本原理:

普遍相对性原理:一切自然定律的表述形式在所有的惯性参考系中均是相同的,不因参考系的不同而不同.

时间同质原理:时间和空间的本质是相同的,它们共同构成了一个四维空间. 取时间为虚轴,空间为实轴,称为**闵可夫斯基空间**,简称**时空**.

时空同质原理包含着以下内容:(1) 时间和空间既然只是同一个时空中的不同分量,那么当变更时空中的四坐标系时,像空间的三个分量可能发生转换一样,时间分量与空间分量也可能发生转换. 这样,爱因斯坦就彻底否定了时间和空间绝对无关的观念. (2) 时间和空间既然只是同一个时空中的不同分量,那么度量时间和空间的单位理应相同. 由于人们认识上的原因,历史上已把时间和空间取成了不同的单位,这样在两个不同单位秒和米之间必定存在着一个转换常数. 称这个转换常数为时空当量,用字符 c 表示,其具体数值则要由实验来测定. (3) 在无引力场的

情况下，四维的时空是欧几里得的.

在时空中建立一个四维坐标系 S，时空中一个点的四位置可以用一个双四元数来表示：

$$R = \mathrm{i}ct + \boldsymbol{r}. \tag{2.1.3}$$

时空点的四位移为

$$R_2 - R_1 = \mathrm{i}c(t_2 - t_1) + \boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1. \tag{2.1.4}$$

四位移模方之负值的平方根称为位移前后两时空点之间的间隔：

$$\Delta S = \sqrt{-\| R_2 - R_1 \|} = \sqrt{c^2(t_2 - t_1)^2 - (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)^2}. \tag{2.1.5a}$$

于是微间隔为

$$\mathrm{d}S = \sqrt{c^2\mathrm{d}t^2 - (\mathrm{d}\boldsymbol{r})^2}. \tag{2.1.5b}$$

时空的一个重要性质是：两个时空点之间的间隔在不同的四坐标系中是相同的，即

$$\begin{cases} \Delta S' = \Delta S, \\ c^2(t_2' - t_1')^2 - (\boldsymbol{r}_2' - \boldsymbol{r}_1')^2 = c^2(t_2 - t_1)^2 - (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)^2. \end{cases} \tag{2.1.6}$$

§2.2 坐标变换

当时空中的四坐标系变更时，时空中给定位置（也称时空点或世界点）的坐标将随之发生变更. 四坐标系的变换可分为两大类：

第一类，坐标系的平动：

新的四坐标系 S' 是由原四坐标系 S 平移了

$$R_0 = \mathrm{i}ct_0 + \boldsymbol{r}_0 \tag{2.2.1}$$

以后所成，那么给定时空点，在新旧坐标系中的四位置 R' 和 R 之间的关系为

$$R' = R - R_0. \tag{2.2.2a}$$

即时空分量分别为

$$\begin{cases} t' = t - t_0, \\ \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0. \end{cases} \tag{2.2.2b}$$

第二类，坐标系的转动：

新的四坐标系 S' 是由原四坐标系 S 绕通过 S 的时空坐标原点的某空间方向为轴转动而成. 那么，给定时空点在新和旧坐标系中的四位置 R' 和 R 之间的关系一般地为

$$R' = M^{+}RM. \tag{2.2.3a}$$

其中 M 称为坐标变换四元数. 设它为

$$\begin{cases} M = m_0 + m\boldsymbol{e}, \\ M^{\dagger} = m_0^* - m^*\boldsymbol{e}. \end{cases} \tag{2.2.4a}$$

其中,$\boldsymbol{e}$ 是转动轴的单位矢量,将(2.2.3a)式展开得

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}ct' + \boldsymbol{r}' &= (m_0^* - m^*\boldsymbol{e})(\mathrm{i}ct + \boldsymbol{r})(m_0 + m\boldsymbol{e}) \\
&= (m_0^* - m^*\boldsymbol{e})(\mathrm{i}ctm_0 - m\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} + \mathrm{i}ctm\boldsymbol{e} + m_0\boldsymbol{r} + m\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{e}) \\
&= \mathrm{i}ctm_0^* m_0 - m_0^* m\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} + \mathrm{i}ctm^* m + m^* m_0\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} \\
&\quad + \mathrm{i}ctm_0^* m\boldsymbol{e} + m_0^* m_0\boldsymbol{r} + m_0^* m\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{e} - \mathrm{i}ctm^* m_0\boldsymbol{e} \\
&\quad + m^* m(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e})\boldsymbol{e} - m^* m_0\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{r} - m^* m\boldsymbol{e}\times(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{e}) \\
&= \mathrm{i}ct(m_0^* m_0 + m^* m) + (m^* m_0 - mm_0^*)\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} \\
&\quad + [\mathrm{i}ct(m_0^* m - m_0 m^*) + (m_0^* m_0 + m^* m)\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}]\boldsymbol{e} \\
&\quad + (m_0^* m_0 - m^* m)[\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e})\boldsymbol{e}] + (m_0^* m + m_0 m^*)\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{e}.
\end{aligned}$$

得到坐标变换的分量形式

$$\begin{cases} t' = (m_0^* m_0 + m^* m)t + \dfrac{\mathrm{i}}{c}(m_0^* m - m_0 m^*)\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}, \\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e} = (m_0^* m_0 + m^* m)\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} + \mathrm{i}c(m_0^* m - m_0 m^*)t, \\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}_{\perp} = (m_0^* m_0 - m^* m)\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_{\perp} + (m_0^* m + m_0 m^*)\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{e}_{\perp}). \end{cases} \tag{2.2.3b}$$

其中,$\boldsymbol{e}_{\perp}$ 是与 $\boldsymbol{e}$ 正交的单位矢量. 上式表明,当四坐标系变更时,给定时空点在新旧坐标系中的时间坐标和沿转轴 $\boldsymbol{e}$ 方向的空间分量之间可能发生转化.

当四坐标系变更时,两空间点之间的间隔是不变的:

$$\|\Delta R'\| = \|M^{\dagger}\|\ \|\Delta R\|\ \|M\| = \|\Delta R\|.$$

因此

$$\|M^{\dagger}\|\ \|M\| = 1. \tag{2.2.4b}$$

即

$$\begin{aligned}
(m_0^{*2} + m^{*2})(m_0^2 + m^2) &= (m_0^* m_0 + m^* m)^2 + (m_0^* m - m_0 m^*)^2 \\
&= (m_0^* m_0 - m^* m)^2 + (m_0^* m + m_0 m^*)^2 = 1.
\end{aligned} \tag{2.2.4c}$$

用两个实数分别记作

$$\begin{cases} \gamma = m_0^* m_0 + m^* m > 0, \\ \lambda = m_0^* m_0 - m^* m. \end{cases} \tag{2.2.5}$$

由(2.2.4c)式知

$$(m_0^* m - m_0 m^*)^2 = 1 - \gamma^2.$$

上式左端是两共轭复数之差的平方,所以小于等于 0,故

$$\gamma^2 \geqslant 1. \tag{2.2.6}$$

同时(2.2.4c)式也表明

$$\lambda^2 \leqslant 1. \tag{2.2.7}$$

从(2.2.5)式解得

$$\begin{cases} m_0^* m_0 = \dfrac{\gamma+\lambda}{2}, \\ m^* m = \dfrac{\gamma-\lambda}{2}. \end{cases}$$

可写成

$$\begin{cases} m_0 = \sqrt{\dfrac{\gamma+\lambda}{2}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}, \\ m = \sqrt{\dfrac{\gamma-\lambda}{2}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_0+\delta)}. \end{cases}$$

所以当四坐标系绕空间 $\boldsymbol{e}$ 轴原点转动时的坐标变换四元数可一般地写成

$$\begin{cases} M = \left(\sqrt{\dfrac{\gamma+\lambda}{2}} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\sqrt{\dfrac{\gamma-\lambda}{2}}\boldsymbol{e}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}, \\ \cos\delta = \sqrt{\dfrac{1-\lambda^2}{\gamma^2-\lambda^2}}\,. \end{cases} \tag{2.2.8}$$

而时空点坐标变换的分量形式(2.2.3b)式成为

$$\begin{cases} t' = \gamma t - \sqrt{\gamma^2-1}\,\dfrac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}}{c}, \\ \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} = \gamma\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e} - \sqrt{\gamma^2-1}\,ct, \\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}_\perp = \lambda\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_\perp + \sqrt{1-\lambda^2}\,\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{e}_\perp). \end{cases} \tag{2.2.9}$$

它由两个基本的变换构成：

(1) $\delta=0$(取 $\delta_0=0$)：

由(2.2.8)式知，$\gamma=1$，并改记 $\lambda=\cos\varphi$，这时坐标变换四元数为

$$\begin{cases} M = \cos\dfrac{\varphi}{2} + \sin\dfrac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}, \\ M^\dagger = \cos\dfrac{\varphi}{2} - \sin\dfrac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}. \end{cases} \tag{2.2.10}$$

时空点的坐标变换则为

$$\begin{cases} t' = t, \\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e} = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}, \\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}_\perp = \cos\varphi\,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_\perp + \sin\varphi\,\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{e}\times\boldsymbol{e}_\perp). \end{cases} \tag{2.2.11}$$

这就是原来三维空间的坐标架绕着 $\boldsymbol{e}$ 轴旋转了 φ 角，形成了新的三维空间坐标架后，时空点在新旧两个坐标架中坐标的变换关系. 时间分量和 $\boldsymbol{e}$ 方向的空间分量保

持不变，而与 $\boldsymbol{e}$ 垂直的空间的两个分量之间发生了变化.

在刚体力学中，研究刚体转动时经常要建立两个三维空间坐标架，一个在惯性参考系中，常称不动系，另一个与刚体固连，常称动系. 两个坐标架之间的关系则用三个欧拉角 (φ,θ,ψ) 来表示，如图 2.1 所示. 即 Oz' 轴与 Oz 轴的夹角为 θ，Oz' 轴在 Oxy 平面上的投影 Ox_1 与 Ox 轴的夹角为 φ，Oy' 轴与 Oxy 和 $Ox'y'$ 两平面的交线 Oy_1 之间的夹角为 ψ.

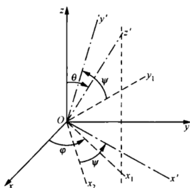


图 2.1

从坐标架 $Oxyz$ 到坐标架 $Ox'y'z'$，可以通过相继的三个转动来完成：$Oxyz$ 绕 Oz 轴旋转 φ 角成 Ox_1y_1z；Ox_1y_1z 绕 Oy_1 轴转 θ 角成 Ox_2y_1z'；Ox_2y_1z' 绕 Oz' 轴旋转 ψ 角成 $Ox'y'z'$.

这样从坐标架 $Oxyz$ 到坐标架 $Ox'y'z'$ 的坐标变换四元数为

$$\begin{cases} M = \left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{k}\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\boldsymbol{j}\right)\left(\cos\frac{\psi}{2}+\sin\frac{\psi}{2}\boldsymbol{k}\right) \\ \quad = \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\psi+\varphi}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\psi-\varphi}{2}\boldsymbol{i} \\ \quad\quad +\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\psi-\varphi}{2}\boldsymbol{j}+\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\psi+\varphi}{2}\boldsymbol{k}, \\ M^{\dagger} = \left(\cos\frac{\psi}{2}-\sin\frac{\psi}{2}\boldsymbol{k}\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}-\sin\frac{\theta}{2}\boldsymbol{j}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{k}\right) \\ \quad = \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\psi+\varphi}{2}-\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\psi-\varphi}{2}\boldsymbol{i} \\ \quad\quad -\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\psi-\varphi}{2}\boldsymbol{j}-\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\psi+\varphi}{2}\boldsymbol{k}. \end{cases} \tag{2.2.12}$$

从不动系 $Oxyz$ 到动系 $Ox'y'z'$，坐标的变换则为

$$\mathrm{i}ct'+\boldsymbol{r}' = M^{\dagger}(\mathrm{i}ct+\boldsymbol{r})M.$$

若要继续讨论刚体的运动学和动力学问题，则由于刚体这个物理模型——任意两个质元之间距离在运动过程中保持不变与狭义相对论的时空观念相悖，因而四元数的算法并不合用. 除非把由四元数表示的物理量作非相对论近似，不过这样四元数算法的特点也将丧失殆尽，所以我们不再继续讨论刚体的问题.

(2) $\delta=\frac{\pi}{2}$（取 $\delta_0=0$）：

由(2.2.8)式知 $\lambda=1$，这样坐标变换四元数为

$$M = M^{\dagger} = \sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}+\mathrm{i}\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}\,\boldsymbol{e}. \tag{2.2.13}$$

时空点的坐标变换则为

$$\begin{cases} t' = \gamma t - \dfrac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{c} \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e}, \\ \boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e} = \gamma \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e} - ct \sqrt{\gamma^2 - 1}, \\ \boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}. \end{cases} \tag{2.2.14}$$

在这种四坐标系的旋转中，与旋转轴 $\boldsymbol{e}$ 垂直的两个空间分量旋转前后保持不变，沿着旋转轴 $\boldsymbol{e}$ 的空间分量与时间分量之间则发生了转化.

在新四坐标系中地点 $\boldsymbol{r}'$ 固定的所有时空点，因

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e}) = \mathrm{d}(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}) = 0.$$

有

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e})}{\mathrm{d}t} = c\sqrt{1 - \dfrac{1}{\gamma^2}} = c\beta, \\ \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp})}{\mathrm{d}t} = 0. \end{cases} \tag{2.2.15}$$

其中

$$\beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\gamma^2}} \leqslant 1. \tag{2.2.16}$$

所以 $\boldsymbol{r}'$ 固定的所有时空点相对于原四坐标系中的三维空间坐标架 $Oxyz$ 以速度 $u = c\beta$ 沿着 $\boldsymbol{e}$ 轴方向运动. 表明新旧两个三维空间坐标架就是沿 $\boldsymbol{e}$ 方向、相对速度为 u 的两个惯性参考系，坐标变换(2.2.14)式就是两个惯性参考系之间的变换，称为**洛伦兹变换**.

(2.2.16)式明确地指出，惯性系之间的变换只能在两个相对速度 $u = c\beta \leqslant c$ 的惯性参考系之间进行. 如果两个惯性参考系之间的相对速度大于时空当量 c，那么所谓的洛伦兹变换是没有意义的. 这一结论在用光速不变原理作为狭义相对论的理论基础时是难于阐明的.

由坐标变换(2.2.14)式可以导出速度在两个惯性参考系之间的变换关系：

$$\begin{cases} v'_{/\!/} = \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e})}{\mathrm{d}t'} = \dfrac{\dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e})}{\mathrm{d}t} - c\beta}{1 - \dfrac{\beta}{c} \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e})}{\mathrm{d}t}} = \dfrac{v_{/\!/} - u}{1 - \dfrac{uv_{/\!/}}{c^2}}, \\ v'_{\perp} = \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp})}{\mathrm{d}t'} = \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp})}{\gamma\left[1 - \dfrac{\beta}{c} \dfrac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e})}{\mathrm{d}t}\right]\mathrm{d}t} = \dfrac{v_{\perp}}{\gamma\left(1 - \dfrac{uv_{/\!/}}{c^2}\right)}, \\ v'^2 = v'^2_{/\!/} + v'^2_{\perp} = c^2 - \dfrac{(c^2 - u^2)(c^2 - v^2)}{\left(c - \dfrac{uv_{/\!/}}{c}\right)^2}. \end{cases} \tag{2.2.17}$$

有

$$\begin{cases} v' > c, & \text{当 } v > c \text{ 时}, \\ v' = c, & \text{当 } v = c \text{ 时}, \\ v' < c, & \text{当 } v < c \text{ 时}. \end{cases} \tag{2.2.18a}$$

反之

$$\begin{cases} v > c, & \text{当 } v' > c \text{ 时}, \\ v = c, & \text{当 } v' = c \text{ 时}, \\ v < c, & \text{当 } v' < c \text{ 时}. \end{cases} \tag{2.2.18b}$$

所以时空当量 c 是一个速度不可逾越的界限,速度大于、等于或小于时空当量 c 的情形是不可能通过惯性系之间的变换而改变的.

§2.3 迈克尔孙-莫雷实验

迈克尔孙-莫雷实验的原理图示于图 2.2.

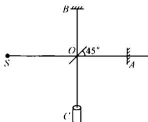


图 2.2

干涉仪以涂银的半透半反射镜 O 为中心有四条臂:光源 S、反光镜 A 和 B,以及观察镜 C. 四臂互相垂直,水平放置,且调整至 $OA=OB=l$. 仪器置于地球 S' 系上随地球的公转沿 OA 方向(记为 $\boldsymbol{e}$)以速度 u 相对于太空中的某惯性参考系 S 运动. 从光源 S 发出的光线 SO 被 O 镜分成 OA 和 OB 两束,分别被反光镜 A 和 B 反射回至 O 镜,汇合成光速 OC,在观察镜 C 处观察干涉图样,干涉图样取决于汇合前两光束 OAO 和 OBO 的光程差.

一、绝对时空观对实验结果的预期

在经典的绝对时空观下,假设了一种特殊的介质,称为"以太". 参考系的概念是相对于以太定义的. 我们认为的光波在真空中的传播,就是在以太中的传播. 在这种时空观下,我们分析迈克尔孙-莫雷实验. 取太空中的绝对静止参考系为 S 系,在绝对静止参考系中光线沿着各个方向传播的速度 v 是相同的. 实验室系 S' 与 S 系间的坐标变换为伽利略变换

$$\begin{cases} t' = t, \\ \boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e} = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e} - ut, \\ \boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} = \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}. \end{cases} \tag{2.3.1}$$

速度变换式为

$$\begin{cases} v'_{/\!/} = v_{/\!/} - u, \\ v'_{\perp} = v_{\perp}. \end{cases} \tag{2.3.2}$$

在绝对静止参考系 S 中，因干涉仪沿 $\boldsymbol{e}$ 方向以速度 u 运动，所以光路 OAO 和 OBO 实际为 $OA'O'$ 和 $OB'O'$（如图 2.3 所示）.

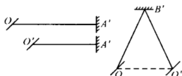


图　2.3

光从 O 到 A' 用时设为 t_1，则有 $vt_1 = l + ut_1$；光从 A' 返回至 O' 用时设为 t_2，则有 $vt_2 = l - ut_2$. 所以光路 $OA'O'$ 的光程为

$$v(t_1 + t_2) = v\left(\frac{l}{v-u} + \frac{l}{v+u}\right) = 2l\,\frac{v^2}{v^2 - u^2}.$$

光从 O 到 B' 用时设为 t_3，则有 $(vt_3)^2 - (ut_3)^2 = l^2$；光从 B' 返回至 O' 用时设为 t_4，则有 $(vt_4)^2 - (ut_4)^2 = l^2$. 所以光路 $OB'O'$ 的光程为

$$v(t_3 + t_4) = 2l\,\frac{v}{\sqrt{v^2 - u^2}}.$$

两束光 $OA'O'$ 和 $OB'O'$ 的光程差

$$(OB'O') - (OA'O') = 2l\left(\frac{v}{\sqrt{v^2 - u^2}} - \frac{v^2}{v^2 - u^2}\right).$$

在实验室系 S' 中来分析，光路 OA 段中的光速为 $v'_{/\!/} = v_{/\!/} - u = v - u$，光到达 A 镜用时 $\frac{l}{v-u}$；光路 AO 段中的光速为 $v'_{/\!/} = v_{/\!/} + u = v + u$，光从 A 镜返至 O 用时 $\frac{l}{v+u}$. 所以光路 OAO 的光程为

$$(OAO) = v\left(\frac{l}{v-u} + \frac{l}{v+u}\right) = 2l\,\frac{v^2}{v^2 - u^2}.$$

光路 OB 段中的光速 $v'_{\perp} = v_{\perp} = \sqrt{v^2 - v_{/\!/}^2}$，而 $v_{/\!/} - u = v'_{/\!/} = 0$，于是光从 O 至 B 用时 $\frac{l}{v'_{\perp}} = \frac{l}{\sqrt{v^2 - u^2}}$，光从 B 返至 O 用时亦为 $\frac{l}{\sqrt{v^2 - u^2}}$，所以光路 OBO 的光程为

$$(OBO)=2l\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}.$$

两束光 OAO 和 OBO 的光程差亦为

$$(OBO)-(OAO)=2l\left(\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}-\frac{v^2}{v^2-u^2}\right).$$

在 S 系和 S' 系中两束光的光程差是相同的.

实验时,以 O 镜与地心的连线为轴把仪器旋转 90°,使 B 镜转至 A 镜处,旋转后的两束光的光程差变为

$$(OBO)-(OAO)=-2l\left(\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}-\frac{v^2}{v^2-u^2}\right).$$

旋转前后两种情况下,两束光的光程差变化了 $4l\left(\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}-\frac{v^2}{v^2-u^2}\right)$,因此干涉条纹也将移动 $\frac{4l}{\lambda}\left(\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}-\frac{v^2}{v^2-u^2}\right)$ 个条纹间距. 用地球公转速率(3×10^4 m/s)来估计 u,$u\ll v$,因此

$$\frac{4l}{\lambda}\left(\frac{v}{\sqrt{v^2-u^2}}-\frac{v^2}{v^2-u^2}\right)\approx\frac{2u^2l}{v^2\lambda}.$$

实验仪器用多次反射技术加大臂长,使 $l\approx11$ m,光源取钠黄光 $\lambda=5893$Å,可得

$$\frac{2u^2}{v^2}\frac{l}{\lambda}\approx0.4.$$

干涉条纹在仪器旋转前后预期将移动 0.4 个条纹间距. 但是实际的观察结果比预期值的 1/20 还小. 考虑到不可避免的实验误差,迈克尔孙-莫雷实验的结果是干涉条纹的零移动.

二、狭义相对论对实验结果的阐释

用狭义相对论来分析问题时,太空中的 S 系是任何一个惯性系,实验室系 S' 是另一个惯性系. S' 系与 S 系之间的坐标变换为

$$\begin{cases}t'=\gamma\left(t-\frac{u}{c^2}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}\right),\\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}=\gamma(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}-ut),\\ \boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}_\perp=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_\perp.\end{cases}\tag{2.3.3a}$$

逆变换为

$$\begin{cases} t=\gamma\left(t'+\dfrac{u}{c^2}\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}\right), \\ \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}=\gamma(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}+ut'), \\ \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_{\perp}=\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}_{\perp}. \end{cases} \tag{2.3.3b}$$

S'系与 S 系之间的速度变换为

$$\begin{cases} v'_{/\!/}=\dfrac{v_{/\!/}-u}{1-\dfrac{v_{/\!/}u}{c^2}}, \\ v'_{\perp}=\dfrac{v_{\perp}}{\gamma\left(1-\dfrac{v_{/\!/}u}{c^2}\right)}. \end{cases} \tag{2.3.4a}$$

逆变换为

$$\begin{cases} v_{/\!/}=\dfrac{v'_{/\!/}+u}{1+\dfrac{v'_{/\!/}u}{c^2}}, \\ v_{\perp}=\dfrac{v'_{\perp}}{\gamma\left(1+\dfrac{v'_{/\!/}u}{c^2}\right)}. \end{cases} \tag{2.3.4b}$$

在实验室系 S'中的考察：

光束从 O 到 A，由 A 返至 O；从 O 到 B，由 B 返至 O 的速度是相同的，设为 v'，用时都是$\frac{l}{v'}$. 因此两路光 OAO 和 OBO 没有光程差. 仪器旋转 90°后两路光也没有光程差，所以旋转前后干涉条纹当然不发生移动，迈克尔孙-莫雷实验的零移动结果是必然的.

在另一个惯性系 S 中来考察：

当光从 O 到达 A 时，在 S' 系中用时 $\frac{l}{v'}$，由(2.3.3b)式知在 S 系中用时 $\gamma l\left(\frac{1}{v'}+\frac{u}{c^2}\right)$. 这时 A 镜的地点则在 $\gamma l\left(1+\frac{u}{v'}\right)$处.

当光从 A 返至 O 时，在 S'系中的时刻为$\frac{2l}{v'}$，由(2.3.4b)式知光在 S 系中的速率为$\dfrac{v'-u}{1-\frac{v'u}{c^2}}$. 这时 O 镜已位于 $\gamma u\,\frac{2l}{v'}$处，因此光从 A 返回至 O 用时

$$\frac{\gamma l\left(1+\dfrac{u}{v'}\right)-\gamma l\,\dfrac{2u}{v'}}{\dfrac{v'-u}{1-\dfrac{v'u}{c^2}}}=\gamma l\left(\frac{1}{v'}-\frac{u}{c^2}\right).$$

所以光从 O 到 A 再返至 O 共用时

$$\gamma l\left(\frac{1}{v'}+\frac{u}{c^2}\right)+\gamma l\left(\frac{1}{v'}-\frac{u}{c^2}\right)=\frac{2\gamma l}{v'}.$$

当光从 O 到达 B 时，因在 S'系中用时$\frac{l}{v'}$，由(2.3.3b)知这时的 B 镜在 S 系中的地点为$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}=\gamma l\frac{u}{v'}$，$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}_{\perp}=l$. 由(2.3.4b)式，在 S 系中的光速为 $v_{/\!/}=u$，$v_{\perp}=\frac{v'}{\gamma}$，所以用时为

$$\frac{l}{v_{\perp}}=\frac{\frac{\gamma l u}{v'}}{v_{/\!/}}=\frac{\gamma l}{v'}.$$

光从 B 返回 O 用时亦为$\frac{\gamma l}{v'}$. 所以光从 O 到 B 再返至 O 共用时$\frac{2\gamma l}{v'}$. 两路光亦没有光程差，仪器旋转前后干涉条纹不会发生移动，实验结果的零移动也是必然的.

迈克尔孙-莫雷实验的结果是对经典的绝对时空观的一个打击，但却是和狭义相对论时空观相自洽. 现在普遍认为迈克尔孙-莫雷实验对狭义相对论的产生起了重要的推动作用.

三、光速不变的性质与实验结果的关系

表 2.1 列出了以狭义相对论阐释迈克尔孙-莫雷实验中光在各光路段上的速度.

表 2.1

光路 \ 惯性参考系	OA	AO	OB	BO
S'系	v'	v'	v'	v'
S 系	$\frac{v'+u}{1+\frac{v'u}{c^2}}$	$\frac{v'-u}{1-\frac{v'u}{c^2}}$	$\sqrt{u^2+\frac{v'^2}{\gamma^2}}$	$\sqrt{u^2+\frac{v'^2}{\gamma^2}}$

如果 S'系中的光速即是时空当量 $v'=c$，那么在两个惯性系 S 和 S' 中各路段上的光速也均是时空当量 c，即光速在不同的惯性系中有不变的性质，必然导致实验零移动的结果.

然而如果在实验室系 S'系中的光速 v'虽各向同性，但与时空当量 c 并不相同，即 $v'\neq c$，那么表 2.1 指出了在另一个惯性参考系中各光路段上的光速并不相同，而且在两个惯性参考系中的光速也不相同. 不过通过前面的分析也已得到了干涉条纹的零移动结果.

由此得出结论：光速在不同的惯性参考系中保持不变，总是时空当量 c，仅仅是实验中干涉条纹零移动的充分条件，并非是必要条件．也即是说，若光速恰好是时空当量 c，则实验中的干涉条纹必是零移动；反之，若实验结果中的干涉条纹是零移动，那么光速却不一定正好就是时空当量 c，在不同的惯性参考系中，光的速度也不一定保持不变．

现在人们可以假想，如果当初迈克尔孙-莫雷在实验时是把仪器浸没在折射率较大的透明介质中进行的，或者虽在空气中进行，但空气的折射率并不如此地接近于 1，那么实验的结果仍然会是干涉条纹的零移动．果真如此的话，不知道光速不变原理的发现是否会受到影响．

§2.4　狭义相对论时空观

狭义相对论对时间和空间最根本的观念是：(1) 所有的惯性参考系的地位是平等的，不存在任何一个惯性系有特殊的地位；(2) 时间和空间的本质是相同的，时间和空间一道构成一个四维空间．当时间和空间分别取成虚轴和实轴时，称为闵可夫斯基空间，简称时空．

在时空中建立两个原点互相重合的四坐标系 S 和 S'，同一个时空点在两个坐标系中的坐标之间的变换关系已于§2.2 中进行了讨论，其中(2.2.14)式称为洛伦兹变换，其物理意义是 S 和 S' 系中两个三维的空间坐标架沿着空间 $\boldsymbol{e}$ 方向以速率 u 相对做匀速直线运动的两个惯性参考系之间的变换．其中的 c 是时空当量，除了已知它是一个与坐标系 S 和 S' 无关的常数以外，其具体数值还有待到研究电磁规律时才能设法测定．

洛伦兹变换中包含了一些狭义相对论具体的时空理论．

一、同时的相对性

时空中的两个时空点 R_1 和 R_2，在不同的坐标系 S 和 S' 中的时差是不同的．

由洛伦兹变换知

$$t_2' - t_1' = \gamma(t_2 - t_1) - \gamma \frac{u}{c^2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1) \cdot \boldsymbol{e}. \tag{2.4.1}$$

如果在 S 系中同时 $(t_2 = t_1)$，但地点不同 $(\boldsymbol{r}_2 \neq \boldsymbol{r}_1)$，那么在 S' 系中就不同时 $(t_2' \neq t_1')$；如果在 S' 系中同时 $(t_2' = t_1')$，那么在 S 系中就不同时 $(t_2 \neq t_1)$．两个事件是否同时是与所选择的惯性参考系有关的，同时与否是相对的．这一理论与绝对时空观有着根本的区别，也与大多数人们头脑中日常形成的传统观念大相径庭．

二、爱因斯坦膨胀

考察 S 系中同一地点 $\boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{r}_1$ 发生的某个事件所经历的时间，在 S 系中若历时 $t_2-t_1>0$，由(2.4.1)式知在 S' 系中则历时

$$t_2'-t_1'=\gamma(t_2-t_1)>t_2-t_1. \tag{2.4.2}$$

注意到这一事件在持续的过程中，它在 S 系中的地点未变，而在 S' 系中的地点是变化着的，这就表明，事件在其中不动的惯性参考系中所经历的时间总是小于该事件在其中运动的惯性参考系中所经历的时间. 事件在其中不动的参考系中所经历的时间称为**原时**.

某惯性参考系中的时间是由与该参考系中固连在一起的时钟测量的，对于事件在其中不动的参考系，就可以由一个与事件固连着的时钟测出事件始末的两个时刻. 对于事件在其中运动的参考系，就需要两个与该参考系固定，且校准了的时钟，一个放在事件的始端，另一个放在事件的末端，分别测出事件始末的两个时刻.

对于上述事件，S' 系中的时钟相对 S' 系不动，测出的时间 $(t_2'-t_1')$ 长，S 系中的时钟相对于 S' 系在以速度 u 运动，测出的时间短，因此运动的时钟走慢了，或者说成运动的时钟每一个单位时间内的含时量增加了，称为**爱因斯坦膨胀**.

三、同地的相对性

时空中的两个时空点 R_1 和 R_2，在不同的坐标系 S 和 S' 系中的地点的差是不同的. 由洛伦兹变换知

$$\begin{cases}(\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_1')\cdot\boldsymbol{e}=\gamma(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}-\gamma u(t_2-t_1),\\(\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_1')\cdot\boldsymbol{e}_\perp=(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}_\perp.\end{cases} \tag{2.4.3}$$

考察在 S 系中不同时刻 $(t_2\neq t_1)$ 发生的两件事. 如果在 S 系中两件事在同一地点 $(\boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{r}_1)$ 发生，那么在 S' 中就不是发生在同一地点 $(\boldsymbol{r}_2'\neq\boldsymbol{r}_1')$. 反之，如果两件事在 S' 系中发生于同一地点 $(\boldsymbol{r}_2'=\boldsymbol{r}_1')$，那么在 S 系中就不是发生在同一地点 $(\boldsymbol{r}_2\neq\boldsymbol{r}_1)$. 所以地点是否相同的观念也是相对的，这一观念与绝对时空观的结论相符，也与人们日常的生活经验相符.

四、洛伦兹收缩

考察某物体的大小，它静止于 S' 系中. (2.4.3)式表明，在与两参考系相对运动方向 $\boldsymbol{e}$ 垂直的方向 $\boldsymbol{e}_\perp$ 上，物体在两参考系中的大小是相同的. 沿着运动方向 $\boldsymbol{e}$，物体在 S' 系中的大小为 $(\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_1')\cdot\boldsymbol{e}$，在 S 系中的大小则为 $(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}$. 不过应注意到，在 S' 系中因物体静止，它始末两端的位置可以在不同的时刻 $(t_2'\neq t_1')$ 测量；而在 S 系中因物体在运动，所以必须同时 $(t_2=t_1)$ 来测量它两端的位置. 这样由

(2.4.3)式得到

$$(\boldsymbol{r}_2' - \boldsymbol{r}_1')\cdot\boldsymbol{e} = \gamma(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e} > (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}. \tag{2.4.4}$$

此式表明,物体运动时沿着运动方向的大小比其静止时的大小缩短了.这一现象称为**洛伦兹收缩**,而物体静止时的长度称为**原长**(或称**固有长度**).

五、时序

考察发生两个事件的时间顺序.

在 S 系中考察,假定事件一在前,事件二在后,$t_2 > t_1$.

在 S' 系中考察,由(2.4.1)式知

$$\begin{cases} t_2' > t_1',\ \text{当}\ t_2 - t_1 > \dfrac{u}{c_2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}\ \text{时}, \\ t_2' < t_1',\ \text{当}\ t_2 - t_1 < \dfrac{u}{c^2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}\ \text{时}. \end{cases} \tag{2.4.5}$$

上式表明,在 S' 系中时序发生颠倒是有可能的,其可能性是

$$\frac{u}{c}\,\frac{(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}}{t_2 - t_1} > c. \tag{2.4.6}$$

两个惯性参考系之间相对运动的速度 u 小于时空当量 c,因此在两个惯性参考系中时序发生颠倒的可能性是

$$\frac{(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{e}}{t_2 - t_1} > c. \tag{2.4.7}$$

对于毫无关联的两件事,例如此刻地球某处的风雨,那刻遥远某个星体的运动状态,(2.4.7)式是很容易满足的,因此在不同的惯性系中两事件的时序发生颠倒是可能的,且并不奇怪.然而如果两件事有着因果联系,例如,某生物从生到死,子弹从发射到中的,时间的先后是不能因参考系的不同而颠倒的.因此,有因果关系的两件事从因到果的运动速度不可能大于时空当量 c,时空当量 c 既是不同惯性参考系之间相对运动速度的极限,也是物质运动速度的极限.

六、对应原理

绝对时空观念在人们的头脑中长期地占据了统治地位,之所以会出现如此情形,原因是用绝对时空观能够阐释当时人们所能观察到的一切自然现象.只有当大自然中出现了人们用它不能阐释的问题后,才迫使人不得不去重新认识时空,不得不去创立新的时空理论来解释它.这个新的时空理论既要能正确地解释新问题,又必须能正确地解释旧理论所能解释的一切问题,这是科学创新时的前提.

狭义相对论的时空理论必须也能正确地阐释绝对时空理论所能阐释的一切问题,这就是在时空观方面的对应原理.

由洛伦兹变换，在物质的速度远小于时空当量 $v \ll c$ 的条件下，得到

$$\begin{cases} dt' = \gamma dt\left[1 - \dfrac{u}{c^2}\dfrac{d(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e})}{dt}\right] \approx dt, \\ d(\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{e}) = \gamma[d(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}) - u dt] \approx d(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}) - u dt. \end{cases} \tag{2.4.8}$$

表明洛伦兹变换在物质速度远小于时空当量的领域近似成了伽利略变换.

20世纪以前，除了光以外，人们在日常生活中所遇到的自然现象其物质的速度都是远小于时空当量的. 即使像日、地之间的运行，其相对运动的速度 $u \sim 10^{-4}c$，也有

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\left(\dfrac{u}{c}\right)^2}} \approx 1 + \frac{1}{2}\left(\frac{u}{c}\right)^2 \approx 1.$$

因此人们自然而然地相信绝对时空观并非是偶然的事情.

七、一个假想实验

为了有助于对狭义相对论时空理论的理解，讨论一个假想的实验. 如图2.4所示，一高速列车以 $u=0.8c$ 的速度运行. 站上 A, B 两地放置了两个已经校准的时钟. 当司机经过 A 地时，时钟 A 指向0，司机即刻把自己所带的时钟 C 校至0. 当司机经过 B 地时，司机的时钟 C 指在30 s处，问此刻时钟 B 指在何处?

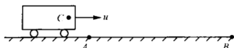


图 2.4

解 $\gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1-0.8^2}} = \dfrac{5}{3}$.

1. *在站系中研究*

时钟 C 历时 $(\Delta t)_C = 30$ s. 它在运动，因爱因斯坦膨胀而走得慢，故它所经历的时间为原时.

A, B 两时钟不同，它们的历时为

$$(\Delta t)_A = (\Delta t)_B = \gamma(\Delta t)_C = \frac{5}{3} \times 30\text{ s} = 50\text{ s}.$$

因此，当司机经过 B 地时，时钟 B 指在50 s处.

2. *在车系中研究*

A, B 两时钟在运动，走得慢，它们所经历的时间为原时.

$$(\Delta t)_A = (\Delta t)_B = \frac{(\Delta t)_C}{\gamma} = \frac{3}{5} \times 30\text{ s} = 18\text{ s}.$$

不过当时钟 C 经 A 地时，A, B 两时钟同时指0是相对站系而言的. 相对于车系，时钟 B 指0并不与时钟 C 校0同时. 由洛伦兹变换知

$$t' = \gamma\left(t - \frac{u}{c^2}x\right).$$

车系中 B 距 A

$$\Delta x = u(\Delta t)_C = 0.8c \times 30 = 24c.$$

站系中 B,A 间相距(原长)

$$\Delta x' = \gamma \Delta x = \frac{5}{3} \times 24c = 40c.$$

所以当时钟 B 指 0 时,它在站系中的位置在 $x_B' = 40c$ 处. 于是当时钟 B 指 0 时,时钟 C 的时刻在车系中为

$$t' = \gamma\left(t - \frac{u}{c^2}x\right) = -\frac{5}{3} \times \frac{0.8c}{c^2} \times 40c\ \text{s} = -\frac{160}{3}\ \text{s}.$$

因此当时钟 C 从 A 地至 B 地,其指针实际是从 $-\frac{160}{3}$ s 走到了 30 s,共历时

$$(\Delta t)_C = \left(30 + \frac{160}{3}\right)\text{s}.$$

而 B 钟则历时

$$(\Delta t)_B = \frac{(\Delta t)_C}{\gamma} = \frac{3}{5} \times \left(30 + \frac{160}{3}\right)\text{s} = 50\ \text{s}.$$

因此,当司机经过 B 地时,时钟 B 指在 50 s 处.

第3章　力　　学

§3.1　质点运动学

一、四位移

在时空中取一四坐标系，质点的四位置可以用(双)四元数表示成

$$R = \mathrm{i}ct + \boldsymbol{r}. \tag{3.1.1}$$

四位置的模方的负值的平方根

$$\sqrt{-\|R\|} = \sqrt{c^2t^2 - r^2}.$$

称为四位置与坐标系原点的间隔.间隔的数值可能是实的，也可能是虚的.

质点的四位移为 $\Delta R = \mathrm{i}c\Delta t + \Delta\boldsymbol{r}$，无穷小四位移

$$\mathrm{d}R = \mathrm{i}c\mathrm{d}t + \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{3.1.2}$$

简称为四微位移.于是微间隔是

$$\begin{aligned} \mathrm{d}s &= \sqrt{-\|\mathrm{d}R\|} = \sqrt{c^2\mathrm{d}t^2 - \mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}} \\ &= c\mathrm{d}t\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} = c\,\frac{\mathrm{d}t}{\gamma}. \end{aligned} \tag{3.1.3}$$

其中

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}},\quad \boldsymbol{\beta} = \frac{1}{c}\boldsymbol{v}. \tag{3.1.4}$$

$\boldsymbol{\beta}$ 是用时空当量 c 归一化了的质点的速度.把微间隔用时空当量 c 归一化：

$$\mathrm{d}\tau = \frac{\mathrm{d}s}{c} = \frac{\mathrm{d}t}{\gamma}, \tag{3.1.5}$$

即为微原时，而 γ 则是时间膨胀因子.

二、四速度

四微位移与微原时的比值

$$V = \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\tau} = \gamma(\mathrm{i}c + \boldsymbol{v}) \tag{3.1.6}$$

称为质点的四速度.四速度的标部 $V_{\mathrm{S}} = \mathrm{i}c\gamma$ 与矢部 $V_{\mathrm{V}} = \gamma\boldsymbol{v}$ 并非独立无关，而是存在着关系式

$$V_S = \mathrm{i}\sqrt{c^2 + V_V \cdot V_V}. \tag{3.1.7}$$

它反映出了时间和空间的内在联系，是质点的时间坐标与空间位置能够组合成一个四元数这种性质的具体体现.

质点的速度 $\boldsymbol{v}$ 与四速度 V 的关系为

$$\boldsymbol{v} = \frac{V_V}{\sqrt{1 + \frac{V_V \cdot V_V}{c^2}}} = \mathrm{i}c\frac{V_V}{V_S}. \tag{3.1.8}$$

质点的四速度的指数形式是

$$V = \mathrm{i}c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\frac{\boldsymbol{v}}{v}}. \tag{3.1.9}$$

其中

$$\alpha = \tanh^{-1}\beta \tag{3.1.10}$$

称为质点的**快度**. 时间膨胀因子 γ、归一化速度 β 与快度 α 之间的关系为

$$\begin{cases} \gamma = \cosh\alpha, \\ \beta = \tanh\alpha. \end{cases} \tag{3.1.11}$$

三、速度的加法

两个惯性参考系 S 和 S'，其中 S' 系以速度 $u = c\beta_u$ 相对 S 系沿空间 $\boldsymbol{e}$ 方向运动. 由 S 系到 S' 系的坐标变换四元数为

$$M = M^{\dagger} = \sqrt{\frac{\gamma_u + 1}{2}} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{\gamma_u - 1}{2}}\,\boldsymbol{e}, \text{ 其中 } \gamma_u = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta_u^2}}.$$

把四速度的洛伦兹变换式 $V' = M^{\dagger}VM$ 展开，得到速度的加法公式

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e} = \dfrac{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e} - u}{1 - \dfrac{u\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}}, \\ \boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} = \dfrac{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}}{\gamma_u\left(1 - \dfrac{u\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}\right)}, \\ \gamma' = \gamma\gamma_u\left(1 - \dfrac{u\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}\right). \end{cases} \tag{3.1.12a}$$

其逆变公式为

$$\begin{cases} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e} = \dfrac{\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e} + u}{1 + \dfrac{u\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}}, \\ \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} = \dfrac{\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}}{\gamma_u\left(1 + \dfrac{u\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}\right)}, \\ \gamma = \gamma'\gamma_u\left(1 + \dfrac{u\boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}}{c^2}\right). \end{cases} \tag{3.1.12b}$$

其中 $\boldsymbol{e}_{\perp}$ 表示与 $\boldsymbol{e}$ 正交方向的单位矢量.

倘若 $u,v \ll c$,则有 $\gamma_u \approx 1, \gamma \approx 1, 1-\frac{u\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}}{c^2} \approx 1$. 于是在低速近似下速度的加法(3.1.12a)式近似为

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e} \approx \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e} - u, \\ \boldsymbol{v}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} \approx \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}. \end{cases}$$

这就是由伽利略变换直接导致的速度的平行四边形加法.

四、快度的加法

在 S 和 S' 系中,四速度的指数形式分别是

$$V = \mathrm{i}c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\frac{\boldsymbol{v}}{v}}, \quad V' = \mathrm{i}c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha'\frac{\boldsymbol{v}'}{v'}}.$$

参考系间变换四元数的指数形式是

$$M = M^{\dagger} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\alpha_u}{2}\boldsymbol{e}}.$$

其中

$$\alpha_u = \tanh^{-1}\beta_u$$

是 S' 系对 S 系的快度. 于是

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha'\frac{\boldsymbol{v}'}{v}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\alpha_u}{2}\boldsymbol{e}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\frac{\boldsymbol{v}}{v}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\alpha_u}{2}\boldsymbol{e}}.$$

如果 $\boldsymbol{v} /\!/ \boldsymbol{e}$,那么就有

$$\alpha' = \alpha - \alpha_u. \tag{3.1.13}$$

表明快度的加法非常简便. 然而,如果质点的速度 $\boldsymbol{v}$ 与参考系间相对运动的速度 $\boldsymbol{u} = u\boldsymbol{e}$ 并不平行,那么三个四元数 $M^{\dagger}$, V 和 M 的乘法次序不可交换,因此就不能用指数之间的加法来简化乘法运算,所以快度加法的实用性是比较局限的.

例　π^- 介子衰变成 μ^- 子:

$$\pi^- \longrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_{\mu}.$$

假设 π^- 介子相对于实验室的速度为 $\boldsymbol{u}$,它衰变产生的 μ^- 子相对于 π^- 介子的速率为 v'. 于是在 π^- 介子前进方向,μ^- 子相对于实验室的快度即为

$$\alpha = \alpha' + \alpha_u.$$

化成速度为

$$\tanh^{-1}\frac{v}{c} = \tanh^{-1}\frac{v'}{c} + \tanh^{-1}\frac{u}{c}.$$

即是

$$v = \frac{v' + u}{1 + \frac{uv'}{c^2}}, \quad \text{或} \quad \beta = \frac{\beta' + \beta_u}{1 + \beta_u\beta'}.$$

时间膨胀因子的加法法则为

$$\begin{aligned}\gamma &= \cosh\alpha = \cosh(\alpha' + \alpha_u) \\ &= \cosh\alpha'\cosh\alpha_u + \sinh\alpha'\sinh\alpha_u \\ &= \gamma'\gamma_u(1 + \beta_u\beta').\end{aligned}$$

对于速度方向的问题，用快度来处理数据和进行理论分析比较方便，在高能物理中经常应用.

§ 3.2 质点动力学

在牛顿力学中，质点的动力学规律是从实践中总结出来的**牛顿第二定律**

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_0}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{f}. \tag{3.2.1}$$

其中

$$\boldsymbol{p}_0 = m_0\boldsymbol{v} \tag{3.2.2}$$

是质点的动量，其中的 m_0 是表示质点本身性质，与质点运动情况无关的常量，称为质点的**质量**.

用速度 $\boldsymbol{v}$ 点乘(3.2.1)式得到

$$\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}m_0v^2\right) = \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}. \tag{3.2.3}$$

上式右端是作用在质点上的力在单位时间内所做的功，因此左端是质点在单位时间内所具能量的增加，故$\frac{1}{2}m_0v^2$ 在可以相差一个与时空无关的常数 B 的意义下是质点所具有的能量

$$E = \frac{1}{2}m_0v^2 + B. \tag{3.2.4}$$

(3.2.3)式称为质点的**能量定理**.

用位矢 $\boldsymbol{r}$ 与(3.2.1)式叉乘得到

$$\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}_0)}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{p}_0 = \frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}_0)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}. \tag{3.2.5}$$

上式右端是作用在质点上的力对于原点的力矩，左端中的

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}_0 \tag{3.2.6}$$

是质点对于原点的角动量.质点所具角动量的变化率等于力施加在质点上的力矩，称为**角动量定理**.能量定理和角动量定理都是由牛顿第二定律推导出来的规律.

以上所述是牛顿力学最基本的规律，它们满足绝对时空观中的力学相对性原理，却不满足狭义相对论时空观下的爱因斯坦相对性原理.举一个最简单的例子来说明上述结论.

假设有一个大小和方向均不变的常力 $\boldsymbol{f}$ 作用在质点上，这样积分(3.2.1)式的

结果将是

$$\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{f}t + \boldsymbol{p}_0|_{t=0},$$

即

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{f}}{m_0}t + \boldsymbol{v}|_{t=0}.$$

此式表明，不论作用力 $\boldsymbol{f}$ 如何地小，以及初始速率 $\boldsymbol{v}|_{t=0}$ 怎样，只要力的作用时间 t 足够地长，质点的速率 v 超过时空当量 c 总是可能的，这与狭义相对论的时空理论相悖. 所以牛顿力学的理论不是相对论性的，它不满足洛伦兹变换的协变性.

一、四动量

为了建立相对论的力学理论，人们将牛顿力学进行改造，使改造后的理论既满足洛伦兹变换下的不变性，从而满足爱因斯坦的相对性原理，又使它在 $v \ll c$ 的情形下还原成为牛顿力学，即满足时空观方面的对应原理.

把标征质点本身性质的物理量 m_0 与质点的四速度 V 相乘，其积

$$\begin{aligned} P = m_0 V &= \mathrm{i}c\gamma m_0 + \gamma m_0 \boldsymbol{v} \\ &= \mathrm{i}cm + m\boldsymbol{v} \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

称作质点的**四动量**. 其中

$$m = \gamma m_0 = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}} \tag{3.2.8}$$

称为质点的相对论性质量，而把 m_0 改称为质点的静质量. 相对论性质量 m 不仅与质点本身的性质 m_0 有关，还与质点的运动情况 v 有关.

定义质点的相对论性动量为

$$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v} = \gamma \boldsymbol{p}_0. \tag{3.2.9}$$

由于 m_0 标征的是质点本身性质的量，与参考系的选取无关，因此在洛伦兹变换中 m_0 是不会改变的，于是由四速度的洛伦兹变换知四动量的洛伦兹变换为

$$P' = M^{\dagger} P M = m_0 M^{\dagger} V M. \tag{3.2.10a}$$

其展开形式则是

$$\begin{cases} m' = \gamma_u \left(m - \dfrac{u}{c^2} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{e} \right), \\ \boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{e} = \gamma_u (\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{e} - um), \\ \boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp} = \boldsymbol{p}' \cdot \boldsymbol{e}_{\perp}. \end{cases} \tag{3.2.10b}$$

其中，u 是两参考系间的相对速率，而 $\gamma_u = \dfrac{1}{\sqrt{1 - \dfrac{u^2}{c^2}}}$.

由于质点四速度的标部和矢部是相关的，因此其四动量的标部 $P_S=\mathrm{i}cm$ 与矢部 $P_V=\boldsymbol{p}$ 也是相关的，即

$$P_S=\mathrm{i}\sqrt{P_V\cdot P_V+m_0^2c^2}. \tag{3.2.11a}$$

也就是

$$mc^2=\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}. \tag{3.2.11b}$$

而且这个关系式在洛伦兹变换下是不会改变的.

二、动力学方程

考察质点的速率远小于时空当量的情况 $v\ll c$，这时

$$m=\gamma m_0=m_0\left(1+\frac{v^2}{2c^2}+\cdots\right)\approx m_0,$$

$$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}=m_0\boldsymbol{v}\left(1+\frac{v^2}{2c^2}+\cdots\right)\approx\boldsymbol{p}_0.$$

于是可以假设把牛顿第二定律修改成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{f}. \tag{3.2.12}$$

作为相对论的动力学方程，随之质点的能量定理也改变成

$$\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}(\gamma m_0\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\gamma m_0c^2)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(mc^2)=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}. \tag{3.2.13}$$

这样质点的能量也从(3.2.4)式变成了

$$E=mc^2+B_0. \tag{3.2.14}$$

其中 B_0 也是与参考系的选取无关的常量，可选取它为 0. 这样质点所具有的能量为

$$E=mc^2, \tag{3.2.15}$$

称为**爱因斯坦质能关系**. 将它作低速近似

$$E=\gamma m_0c^2=m_0c^2\left(1+\frac{v^2}{2c^2}+\cdots\right)\approx\frac{1}{2}m_0v^2+m_0c^2.$$

考虑到对应原理，(3.2.4)式中的常量

$$B=m_0c^2, \tag{3.2.16}$$

称为质点的**静质能**.

由假设的动力学方程(3.2.12)以及由此导出的能量定理(3.2.13)，得到

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\tau}=\gamma\left[\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}(mc)}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}\right]=\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot\gamma\boldsymbol{f}+\gamma\boldsymbol{f}=F. \tag{3.2.17}$$

这就是相对论力学中的动力学方程，其中的右端

$$F=\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot\gamma\boldsymbol{f}+\gamma\boldsymbol{f} \tag{3.2.18}$$

称为**四元力**，显然它的标部和矢部也是相关的.

为了使(3.2.17)式具有洛伦兹变换时的不变性，四元力的洛伦兹变换应该是

$$F' = M^{\dagger}FM. \tag{3.2.19a}$$

其标部和矢部则分别为

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}'\cdot\boldsymbol{f}' = \dfrac{(\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{f}}{1-\dfrac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}}{c^2}}, \\ \boldsymbol{f}' = \dfrac{\boldsymbol{f}-\gamma_u\dfrac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}}{c^2}\boldsymbol{u}+(\gamma_u-1)\dfrac{\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{u}}{u^2}\boldsymbol{u}}{\gamma_u\left(1-\dfrac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}}{c^2}\right)}. \end{cases} \tag{3.2.19b}$$

表明作用在质点上的力在不同的参考系中来考察是不同的.

简单考察一下动力学方程(3.2.12)的合理性. 假设作用在质点上的 $\boldsymbol{f}$ 是大小和方向均不变的常力，对(3.2.12)式积分后的结果为

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{f}t + \boldsymbol{p}|_{t=0} = \frac{m_0\boldsymbol{v}}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}.$$

当作用时间 $t\to\infty$时，$v\to c$，符合相对论时空观是明显的. 当然相对论力学基本方程(3.2.12)、(3.2.13)的正确性最终还得靠实践来检验，现今高能物理($v\leqslant c$)的发展已全面地证实了相对论的理论.

三、四角动量方程

分别定义

$$\begin{aligned} R^{*}P &= (-\mathrm{i}ct+\boldsymbol{r})\left(\frac{\mathrm{i}}{c}E+\boldsymbol{p}\right) \\ &= Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}+\mathrm{i}\left(\frac{E}{c}\boldsymbol{r}-ct\boldsymbol{p}\right)+\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} \end{aligned} \tag{3.2.20}$$

和

$$\begin{aligned} m_0c^2+R^{*}F &= m_0c^2+(-\mathrm{i}ct+\boldsymbol{r})\gamma\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}+\boldsymbol{f}\right) \\ &= \gamma\left\{\frac{m_0c^2}{\gamma}+(\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\left[\left(\frac{\boldsymbol{v}}{c}\cdot\boldsymbol{f}\right)\boldsymbol{r}-ct\boldsymbol{f}\right]+\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}\right\} \end{aligned} \tag{3.2.21}$$

为质点关于原点的四角动量和受到的四力矩，由此得到了质点的四角动量方程

$$\frac{\mathrm{d}(R^{*}P)}{\mathrm{d}\tau} = m_0c^2+R^{*}F. \tag{3.2.22}$$

这是相对论动力学方程的另一种形式. 它是集动力学方程$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{f}$，相对论能量定理

$\frac{dE}{dt}=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}$，角动量定理$\frac{d(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})}{dt}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}$于一身的更加普遍的方程.其中只有$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt}=\boldsymbol{f}$是实验规律，其他则是这一定律的推论.不过由四角动量和四力矩的构成中反映出了原来三维空间中的一些物理量之间的内在联系.

由于四角动量和四力矩是由两个四物理量相乘构成的，因此它们的洛伦兹变换性质与单个四物理量的洛伦兹变换性质有所不同.因

$$R'^{*}=\widetilde{M}R^{*}M^{*},\quad P'=M^{+}PM,\quad F'=M^{+}FM.$$

故

$$\begin{cases}R'^{*}P'=\widetilde{M}R^{*}M^{*}M^{+}PM=\widetilde{M}R^{*}PM,\\ m_0c^2+R'^{*}F'=m_0c^2+\widetilde{M}R^{*}M^{*}M^{+}FM=\widetilde{M}(m_0c^2+R^{*}F)M.\end{cases}\tag{3.2.23}$$

展开上式，表明四角动量和四力矩的标部均是洛伦兹不变量.其中，四角动量的标部

$$E't'-\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'=Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\tag{3.2.24}$$

的洛伦兹不变性反映了平面波位相的洛伦兹不变性.

与其他四物理量对比，四角动量和四力矩有一些独特之处：(1) 它们的矢部均是复的，都是由两个三物理量组合而成的，这反映了这两个物理量之间的内在联系；(2) 质点受到的四力矩不仅与力有关，还与质点本身的性质——静质量有关.即使质点不受力，四力矩仍存在着非零的标部 m_0c^2；(3) 在质点不受力的情形下，四角动量的标部也不守恒

$$\frac{d(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}{dt}=\frac{m_0c^2}{\gamma}.\tag{3.2.25}$$

它总以$\frac{m_0c^2}{\gamma}$的速率在增长，在不同的惯性参考系中其增长速率不同.只有静质量为零的质点，不受力时其四角动量的标部 $Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}$ 不随时间增长，且与参考系无关.

各种四物理量的洛伦兹变换性质反映出了一些重要的物理规律.

洛伦兹变换四元数 $M=\sqrt{\frac{\gamma_u+1}{2}}+\mathrm{i}\sqrt{\frac{\gamma_u-1}{2}}\boldsymbol{e}$ 及其各种共轭 $\widetilde{M}$，M^{*}，M^{+} 和 M^{-1}的模方均为 1，所以各四物理量的模方均是洛伦兹不变量：

(1) $\|R_2-R_1\|$不变，体现了间隔和原时是洛伦兹不变量；

(2) $\|V\|=-c^2$ 不变，体现了时空当量 c 的洛伦兹不变性.当通过实验测定了真空中的光速，并由电磁理论确定真空中的光速就是时空当量 c 以后，光速不变才成了时空同质原理的推论，这就是本文用时空同质原理替代光速不变原理来建立狭义相对论的原因；

(3) $\|P\|=-m^2c^2+p^2=-m_0^2c^2$ 不变，体现了相对论的能量和动量关系式

$$E^2-p^2c^2-m_0^2c^4=0\tag{3.2.26}$$

是洛伦兹协变的.这一方程在量子理论中成了建立一切微观粒子的相对论性波动方程的基础;

(4) $\|F\|$, $\|m_0 c^* + R^* F\|$不变还体现了 $\gamma^2\left[f^2-\left(\frac{\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}}{c}\right)^2\right]$, $E\boldsymbol{f}\cdot(t\boldsymbol{v}-\boldsymbol{r})$也是洛伦兹不变量.

四、例:质点在平方反比力场中的运动

作用在质点上的力为

$$\boldsymbol{f}=-K\frac{\boldsymbol{r}}{r^3},\quad K>0\ \text{是常量}.$$

用牛顿力学和相对论力学两种理论来处理质点的运动以进行对照.

用圆柱坐标系(ρ,φ,z),把角动量 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 的方向取为 z 向.由能量方程

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}=-K\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{K}{r}\right)$$

得能量守恒定理

$$E-\frac{K}{r}=\varepsilon\ \text{(常数)}.$$

由角动量方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}=0$$

得到角动量守恒

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=l\boldsymbol{e}_z.$$

表明质点在与 $\boldsymbol{e}_z$ 轴垂直的平面内运动.于是

$$\begin{cases}\boldsymbol{r}=\rho\boldsymbol{e}_\rho,\\ \boldsymbol{v}=\dot{\rho}\boldsymbol{e}_\rho+\rho\dot{\varphi}\boldsymbol{e}_\varphi,\\ \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}=\rho^2\dot{\varphi}\boldsymbol{e}_z.\end{cases}$$

1. 用牛顿力学处理

因为

$$\begin{cases}m_0\rho^2\dot{\varphi}=l,\\ \dfrac{1}{2}m_0(\dot{\rho}^2+\rho^2\dot{\varphi}^2)-\dfrac{K}{\rho}=\varepsilon-m_0c^2=\dfrac{1}{2}m_0\left(\dot{\rho}^2+\dfrac{l^2}{m_0^2\rho^2}\right)-\dfrac{K}{\rho}.\end{cases}$$

由此导出质点的轨迹方程

$$\left(\frac{m_0}{l}\dot{\rho}\right)^2=\left(\frac{\dot{\rho}}{\rho^2\dot{\varphi}}\right)^2=\left(\frac{1}{\rho^2}\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}\varphi}\right)^2=\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}\right)^2$$

$$=\frac{2m_0}{l^2}\left(\varepsilon-m_0c^2+\frac{K}{\rho}\right)-\frac{1}{\rho^2}.$$

对 φ 再求导一次得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\frac{1}{\rho}+\frac{1}{\rho}-\frac{m_0K}{l^2}\right)=0.$$

由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}=0,$$

得

$$\frac{1}{\rho}=\frac{m_0K}{l^2}$$

为圆轨道. 由

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\frac{1}{\rho}+\frac{1}{\rho}-\frac{m_0K}{l^2}=0,$$

得

$$\frac{1}{\rho}=\frac{m_0K}{l^2}\left[1+\sqrt{1+\frac{2l^2(\varepsilon-m_0c^2)}{m_0K^2}}\cos(\varphi-\varphi_0)\right]$$

为椭圆轨道,其近日点和远日常点分别为

$$\begin{cases}\dfrac{1}{\rho_{\min}}=\dfrac{m_0K}{l^2}\left[1+\sqrt{1+\dfrac{2l^2(\varepsilon-m_0c^2)}{m_0K^2}}\right],\\[2ex]\dfrac{1}{\rho_{\max}}=\dfrac{m_0K}{l^2}\left[1-\sqrt{1+\dfrac{2l^2(\varepsilon-m_0c^2)}{m_0K^2}}\right].\end{cases}$$

2. 用相对论力学处理

由

$$\begin{aligned}\frac{1}{\gamma^2}&=1-\frac{v^2}{c^2}=1-\frac{1}{c^2}(\dot{\rho}^2+\rho^2\dot{\varphi}^2)\\&=1-\frac{\rho^4\dot{\varphi}^2}{c^2}\left(\frac{\dot{\rho}^2}{\rho^4\dot{\varphi}^2}+\frac{1}{\rho^2}\right)=1-\frac{l^2}{\gamma^2m_0^2c^2}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}\right)^2+\frac{1}{\rho^2}\right]\end{aligned}$$

得

$$\gamma^2=1+\frac{l^2}{m_0^2c^2}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}\right)^2+\frac{1}{\rho^2}\right]=\frac{1}{m_0^2c^4}\left(\varepsilon+\frac{K}{\rho}\right)^2.$$

对 φ 再求导一次得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\frac{1}{\rho}+\frac{1}{\rho}\right)=\frac{K}{l^2c^2}\left(\varepsilon+\frac{K}{\rho}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}.$$

由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\frac{1}{\rho}=0,$$

得到

$$\frac{1}{\rho}=\frac{\varepsilon K}{l^2c^2-K^2}=\frac{m_0^2c^4-\varepsilon^2}{\varepsilon K}$$

为圆轨道. 由

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}\frac{1}{\rho}+\left(1-\frac{K^2}{l^2c^2}\right)\frac{1}{\rho}=\frac{\varepsilon K}{l^2c^2},$$

得到

$$\frac{1}{\rho}=\frac{\varepsilon K}{l^2c^2-K^2}\left\{1+e\cos\left[\sqrt{1-\frac{K^2}{l^2c^2}}(\varphi-\varphi_0)\right]\right\}$$

是进动着的近似的椭圆轨道. 其中偏心率

$$e=\frac{\sqrt{\varepsilon^2K^2+(m_0^2c^4-\varepsilon^2)(K^2-l^2c^2)}}{\varepsilon K}.$$

进动角

$$\Delta\varphi=\frac{2\pi}{\sqrt{1-\frac{K^2}{l^2c^2}}}-2\pi\approx\frac{\pi K^2}{l^2c^2}.$$

把相对论的结果作 $v\ll c$ 的低速近似，就还原成了牛顿力学的结果.

§3.3　质点组力学

在粒子的衰变或粒子反应中，反应之前和之后的粒子均可当做质点，所以可以当做是从初始质点组演变成终了质点组的过程.

一、动力学方程

设第 j 个质点的四动量为

$$P_j=\frac{\mathrm{i}}{c}E_j+\boldsymbol{p}_j,\quad j=1,2,3,\cdots.$$

称

$$P=\sum P_j=\frac{\mathrm{i}}{c}\sum E_j+\sum\boldsymbol{p}_j=\frac{\mathrm{i}}{c}E+\boldsymbol{p}\tag{3.3.1}$$

为质点组的四动量，其中

$$\begin{cases}E=\sum E_j,\\ \boldsymbol{p}=\sum\boldsymbol{p}_j\end{cases}\tag{3.3.2}$$

为质点组的能量和动量.

设第 j 个质点受到的外力为 $\boldsymbol{f}_j^{外}$，质点组内第 k 个质点施于第 j 个质点的内力为 $\boldsymbol{f}_{jk}^{内}$. 由牛顿第三定律知

$$f_{jk}^{内} + f_{kj}^{内} = 0.$$

则质点组的动量定理和能量定理分别为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \sum \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}_j}{\mathrm{d}t} = \sum \left(\boldsymbol{f}_j^{外} + \sum_{k\neq j} \boldsymbol{f}_{jk}^{内}\right) = \sum \boldsymbol{f}_j^{外} \tag{3.3.3}$$

和

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} &= \sum \frac{\mathrm{d}E_j}{\mathrm{d}t} = \sum \boldsymbol{v}_j \cdot \left(\boldsymbol{f}_j^{外} + \sum_{k\neq j} \boldsymbol{f}_{jk}^{内}\right) \\ &= \sum \boldsymbol{v}_j \cdot \boldsymbol{f}_j^{外} + \sum_j \sum_{k>j} (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_k) \cdot \boldsymbol{f}_{jk}.\end{aligned} \tag{3.3.4}$$

如果内力是保守力，那么质点组具有势能 U，且

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\sum_j \sum_{k>j} (\boldsymbol{v}_j - \boldsymbol{v}_k) \cdot \boldsymbol{f}_{jk}. \tag{3.3.5}$$

这样

$$\frac{\mathrm{d}(E+U)}{\mathrm{d}t} = \sum \boldsymbol{v}_j \cdot \boldsymbol{f}_j^{外}. \tag{3.3.6}$$

若质点组不受外力

$$\boldsymbol{f}_j^{外} = 0, \quad j = 1,2,3,\cdots.$$

则质点组的动量和能量均守恒，即

$$\begin{cases}\boldsymbol{p} = 常数, \\ E + U = 常数.\end{cases}$$

在粒子反应中，通常的情况是反应前和后的势能相同，且一般是 0，因此反应前后质点组的能量 E（包括静质能和动能）守恒.

二、不变能量和 Q 值

质点组的动量为零的参考系称为动心系，记作 S_{CM}. 由四动量的洛伦兹变换

$$\begin{aligned}P' &= \sum P_j' = \sum (M^{\dagger} P_j M) \\ &= M^{\dagger} \left(\sum P_j\right) M = M^{\dagger} P M\end{aligned} \tag{3.3.7}$$

知其模方

$$\| P \| = \left(\frac{\mathrm{i}}{c}E + \boldsymbol{p}\right)\left(\frac{\mathrm{i}}{c}E - \boldsymbol{p}\right) = -\frac{E^2}{c^2} + p^2 = -\frac{E_{\mathrm{CM}}^2}{c^2} \tag{3.3.8}$$

是洛伦兹不变量，其中，E_{CM} 称为不变能量，也就是质点组在动心系中所具有的能量. 这种能量是能够参与粒子反应前后静质能和动能之间互相转化的能量，而能量 E 中的 $E - E_{\mathrm{CM}} = E - \sqrt{E^2 - c^2 p^2}$ 部分是不可提供给反应的，原因是反应前后的动量应守恒.

质点组的能量 E 由质点组的静质能 $\sum m_{0j}c^2$ 和动能 $\sum E_{\mathrm{K}j}$ 叠加而成

$$E = \sum (m_{0j}c^2 + E_{Kj}) = m_0 c^2 + E_K. \tag{3.3.9}$$

粒子反应前和后静质能的差值称为反应的Q值

$$Q = (m_{0始} - m_{0末})c^2 = E_{K末} - E_{K始}. \tag{3.3.10}$$

$Q>0$ 的反应为放热反应,$Q<0$ 的反应为吸热反应.

在粒子的衰变

$$\mathrm{A} \rightarrow \mathrm{B}_1 + \mathrm{B}_2 + \cdots \tag{3.3.11}$$

中,都是 $Q>0$ 放热反应,凡 $Q<0$ 的吸热过程均不是衰变.

在粒子反应

$$\mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_2 \rightarrow \mathrm{B}_1 + \mathrm{B}_2 + \cdots \tag{3.3.12}$$

中,对于 $Q<0$ 的吸热过程,当粒子 A_2 静止时,入射粒子 A_1 的能量 E_1 必须大于或等于某一个值 E_{th},反应才可能发生,这个能使反应发生的入射粒子的最小能量 E_{th} 称为反应的阈能,而入射粒子必须具有的最小动能 $E_{Kth}=E_{th}-m_{01}c^2$ 称为反应的阈动能.

三、两体问题

1. 两体衰变

在(3.3.11)式所示的衰变过程中,母粒子 A 静止,其静质量为 m_0.生成粒子的动量和能量分别为 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2$ 和 E_1,E_2.

由动量守恒

$$\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 = 0,$$

和能量守恒

$$m_0 c^2 = E_1 + E_2 = \sqrt{c^2 p_1^2 + m_{01}^2 c^4} + \sqrt{c^2 p_2^2 + m_{02}^2 c^4}$$

可知

$$p_2^2 + m_{02}^2 c^2 = p_1^2 + m_{01}^2 c^2 + m_0^2 c^2 - 2m_0 c\sqrt{p_1^2 + m_{01}^2 c^2},$$

$$p_1^2 + m_{01}^2 c^2 = \left(\frac{m_0^2 + m_{01}^2 - m_{02}^2}{2m_0}c\right)^2.$$

由此得到

$$p_1^2 = p_2^2 = \left[\left(\frac{m_0^2 + m_{01}^2 - m_{02}^2}{2m_0}\right)^2 - m_{01}^2\right]c^2$$

$$= \left(\frac{c}{2m_0}\right)^2 [m_0^2 - (m_{01} + m_{02})^2][m_0^2 - (m_{01} - m_{02})^2].$$

所以生成粒子的能量分别为

$$\begin{cases} E_1 = \sqrt{c^2 p_1^2 + m_{01}^2 c^4} = \dfrac{m_0^2 + m_{01}^2 - m_{02}^2}{2m_0}c^2, \\ E_2 = \sqrt{c^2 p_2^2 + m_{02}^2 c^2} = \dfrac{m_0^2 + m_{02}^2 - m_{01}^2}{2m_0}c^2. \end{cases} \tag{3.3.13a}$$

生成粒子的动能分别为

$$\begin{cases} E_1 - m_{01}c^2 = \dfrac{(m_0 - m_{01})^2 - m_{02}^2}{2m_0}c^2, \\ E_2 - m_{02}c^2 = \dfrac{(m_0 - m_{02})^2 - m_{01}^2}{2m_0}c^2. \end{cases} \tag{3.3.13b}$$

衰变的 Q 值

$$Q = (m_0 - m_{01} - m_{02})c^2. \tag{3.3.14}$$

例 1 $\pi^0 \to 2\gamma$. 已知 $(m_0)_\pi = 135.0\,\mathrm{MeV}/c^2$. 求 π^0 静止的参考系内 γ 的动量和能量.

解 $\boldsymbol{p}_{1\gamma} + \boldsymbol{p}_{2\gamma} = \boldsymbol{p}_\pi = 0$;

$$E_\gamma = \frac{1}{2}(m_0)_\pi c^2 = 67.5\,\mathrm{MeV};$$

$$p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c} = 67.5\,\mathrm{MeV}/c.$$

例 2 $\Lambda^0 \to \mathrm{p} + \pi^-$，已知 $(m_0)_\Lambda = 1115.6\,\mathrm{MeV}/c^2$，$(m_0)_\mathrm{p} = 938.3\,\mathrm{MeV}/c^2$，$(m_0)_\pi = 139.6\,\mathrm{MeV}/c^2$. 求 p 和 π^- 的动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E，以及衰变的 Q 值.

解 $p_\mathrm{p} = p_\pi = \dfrac{c}{2(m_0)_\Lambda}\sqrt{\{(m_0)_\Lambda^2 - [(m_0)_\mathrm{p} + (m_0)_\pi]^2\}\{(m_0)_\Lambda^2 - [(m_0)_\mathrm{p} - (m_0)_\pi]^2\}}$

$$= \frac{c}{2\times 1115.6}\sqrt{[1115.6^2 - (938.3 + 139.6)^2][1115.6^2 - (938.3 - 139.6)^2]}$$

$$= 100.4\,\mathrm{MeV}/c;$$

$$E_\mathrm{p} - (m_0)_\mathrm{p}c^2 = \frac{[(m_0)_\Lambda - (m_0)_\mathrm{p}]^2 - (m_0)_\pi^2}{2(m_0)_\Lambda}c^2 = 5.35\,\mathrm{MeV};$$

$$E_\pi - (m_0)_\pi c^2 = \frac{[(m_0)_\Lambda - (m_0)_\pi]^2 - (m_0)_\mathrm{p}^2}{2(m_0)_\Lambda}c^2 = 32.35\,\mathrm{MeV};$$

$$Q = [(m_0)_\Lambda - (m_0)_\mathrm{p} - (m_0)_\pi]c^2 = 37.7\,\mathrm{MeV}.$$

在两体衰变中，(3.3.13a)式表明所生成的两种粒子的能量是确定了的. 实践中发现，从核的 β 衰变中发射出的电子的能量却有着连续的分布，因此判断中子的衰变不可能是 $\mathrm{n} \to \mathrm{p} + \mathrm{e}$，而应该是 $\mathrm{n} \to \mathrm{p} + \mathrm{e} + \tilde{\nu}_\mathrm{e}$. 这就是中微子假说形成的根据，而之后被其他实验所证实了的.

2. 两体反应

由(3.3.12)式所示的粒子反应

$$\mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_2 \to \mathrm{B}_1 + \mathrm{B}_2 + \cdots.$$

反应前质点组的动量和能量分别是

$$\begin{cases} \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2, \\ E = E_1 + E_2 = (\gamma_1 m_{01} + \gamma_2 m_{02})c^2. \end{cases}$$

其中，$\gamma_1=\sqrt{1+\frac{p_1^2}{m_{01}^2c^2}}$，$\gamma_2=\sqrt{1+\frac{p_2^2}{m_{02}^2c^2}}$. 质点组的不变能量为

$$E_{CM}=\sqrt{E^2-c^2p^2}=\sqrt{(E_1+E_2)^2-c^2(\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2)^2}$$
$$=\sqrt{m_{01}^2c^4+m_{02}^2c^4+2\gamma_1\gamma_2m_{01}m_{02}c^4-2c^2\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{p}_2}.$$

在粒子 A_2 静止的参考系中，$\boldsymbol{p}_2=0$，$\gamma_2=1$，A_1 为入射粒子，这时不变能量为

$$E_{CM}=\sqrt{m_{01}^2c^4+m_{02}^2c^4+2E_1m_{02}c^2}. \tag{3.3.15}$$

对于吸热反应 $Q<0$，若 E_{CM}全部转化成生成物质的静质能 m_0c^2，这时入射粒子 A_1 的能量即是反应的阈能

$$E_{th}=\frac{m_0^2-m_{01}^2-m_{02}^2}{2m_{02}}c^2. \tag{3.3.16a}$$

反应的阈动能

$$E_{Kth}=E_{th}-m_{01}c^2=-Q\frac{m_0+m_{01}+m_{02}}{2m_{02}}. \tag{3.3.16b}$$

在动心系中，$\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=0$，不变能量为

$$E_{CM}=E_1+E_2. \tag{3.3.17}$$

对于吸热反应，这个能量若全部转化成生成粒子的静质能 $m_0c^2=E_1+E_2$，这时 E_{CM}就是两个粒子能够产生反应的最小能量. 由能量和动量关系可得到

$$\begin{cases}E_1=\dfrac{m_0^2+m_{01}^2-m_{02}^2}{2m_0}c^2,\\ E_2=\dfrac{m_0^2+m_{02}^2-m_{01}^2}{2m_0}c^2.\end{cases} \tag{3.3.18a}$$

能够使反应产生的两个粒子的最小动能为

$$\begin{cases}E_1-m_{01}c^2=\dfrac{(m_0-m_{01})^2-m_{02}^2}{2m_0}c^2,\\ E_2-m_{02}c^2=\dfrac{(m_0-m_{02})^2-m_{01}^2}{2m_0}c^2.\end{cases} \tag{3.3.18b}$$

(3.3.18a)式的形式与(3.3.13a)式完全相同，但(3.3.13a)式是当母粒子静止时两体衰变后生成后两个粒子的能量，而(3.3.18a)式是两个粒子碰撞产生反应必须具有的最小能量.

例 3 $p+p\rightarrow p+p+\pi^0$，已知$(m_0)_p=938.3\,\text{MeV}/c^2$，$(m_0)_\pi=135.0\,\text{MeV}/c^2$. 求阈动能.

解 $Q=[(m_0)_p+(m_0)_p-(m_0)_p-(m_0)_p-(m_0)_\pi]c^2$
$=-(m_0)_\pi c^2=-135.0\,\text{MeV}.$

若用高能 p 打静止的 p 的方法，则高能 p 的阈动能为

$$E_{Kth}=-Q\frac{(m_0)_p+(m_0)_p+(m_0)_p+(m_0)_p+(m_0)_\pi}{2(m_0)_p}$$

$$= -Q\left[2+\frac{(m_0)_\pi}{2(m_0)_p}\right] = 279.7\,\mathrm{MeV}.$$

如果用两个相同能量的质子对撞来实现这一反应，那么每个 p 所需的最小动能为

$$E_K = \frac{1}{2}(m_0)_\pi c^2 = 67.5\,\mathrm{MeV}.$$

两个 p 所需的最小动能为

$$2E_K = 135.0\,\mathrm{MeV}.$$

人工的粒子反应通常在实验室内进行，因同一种粒子反应在动心系内所需的粒子动能最小，所以从节省能量的角度出发使实验室系成为动心系最恰当，这就是人们制造对撞机以替代单个加速器打靶技术的原因. 不过附带要说明，两股束流对撞能够产生反应的概率比单股束流打靶产生反应的概率要小得多.

§3.4 多普勒效应

微观粒子的根本特点是具有波粒二象性，描述其粒子性的物理量是四动量

$$P = \frac{\mathrm{i}}{c}E + \boldsymbol{p}. \tag{3.4.1}$$

描述其波动性的物理量是四波矢

$$K = \frac{\mathrm{i}}{c}\omega + \boldsymbol{k}. \tag{3.4.2}$$

其中 $\boldsymbol{k}$ 是三维空间的波矢量，它的方向表示波行进的方向，它的大小与波长 λ 成反比

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \tag{3.4.3}$$

波速

$$v = \lambda\nu = \lambda\frac{\omega}{2\pi} = \frac{\omega}{k}. \tag{3.4.4}$$

其中，ν 为波的频率，$\omega=2\pi\nu$ 是角频率.

量子理论认为，微观粒子的波动性和粒子性有着内在的联系，即 P 与 K 成正比

$$P = \hbar K. \tag{3.4.5}$$

比例常数 $\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$ 称为归一化普朗克常数.

对于光子，波速 v 就是时空当量 c，所以

$$\begin{cases} k = \dfrac{\omega}{c}, \\ K = \mathrm{i}k + \boldsymbol{k}. \end{cases} \tag{3.4.6}$$

由四动量的洛伦兹变换知四波矢的洛伦兹变换为

$$K' = M^{\dagger} K M. \tag{3.4.7}$$

图 3.1

考察光源和探测器相对运动的情况. 如图3.1所示,光源相对于探测器以速度

$$c\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{u}$$

运动,发出的光的波矢为 $\boldsymbol{k}'$,其方向沿着光源与探测器的连线,由光源指向探测器,光频为

$$\nu' = \frac{ck'}{2\pi}.$$

取光源为 S' 系,探测器为 S 系,探测器接收到的光的四波矢为

$$\begin{aligned} K &= \mathrm{i}k + \boldsymbol{k} = (M^{\dagger})^{-1}(\mathrm{i}k' + \boldsymbol{k}')M^{-1} = \widetilde{M}(\mathrm{i}k' + \boldsymbol{k}')\widetilde{M} \\ &= \mathrm{i}\gamma k'(1 + \beta\cos\theta') + \boldsymbol{k}' + \gamma\beta k' \frac{\boldsymbol{u}}{u} + (\gamma - 1)k'\cos\theta' \frac{\boldsymbol{u}}{u}. \end{aligned}$$

故

$$\begin{cases} \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}' + [\gamma\beta k' + (\gamma - 1)k'\cos\theta'] \dfrac{\boldsymbol{u}}{u}, \\ k = \gamma k'(1 + \beta\cos\theta'). \end{cases} \tag{3.4.8}$$

由

$$\boldsymbol{k} \cdot \frac{\boldsymbol{u}}{u} = k\cos\theta = \gamma k'(\beta + \cos\theta')$$

得

$$\begin{cases} \cos\theta = \dfrac{\beta + \cos\theta'}{1 + \beta\cos\theta'}, \\ \nu = \nu'\gamma(1 + \beta\cos\theta'). \end{cases} \tag{3.4.9}$$

探测器探测到的光频和传播方向与光源发射的光频和方向有了变化.

正向:光源和探测器沿着连线方向靠近,$\theta' = 0$. 有

$$\begin{cases} \theta = 0, \\ \nu = \nu'\gamma(1 + \beta) = \nu'\sqrt{\dfrac{1 + u/c}{1 - u/c}} > \nu'. \end{cases}$$

探测到的光频比光源发射的光频大,方向未变.

背向:光源和探测器沿着连线方向背离,$\theta' = \pi$. 有

$$\begin{cases}\theta = \pi, \\ \nu = \nu'\gamma(1-\beta) = \nu'\sqrt{\dfrac{1-u/c}{1+u/c}} < \nu'.\end{cases}$$

探测到的光频比光源发射的光频小，方向未变.

横向：光源和探测器相对运动的方向与两者的连线垂直，$\theta' = \dfrac{\pi}{2}$. 有

$$\begin{cases}\theta = \arccos\beta, \\ \nu = \nu'\gamma = \dfrac{\nu'}{\sqrt{1-u^2/c^2}} > \nu'.\end{cases}$$

探测到的光频仍比发射的光频大.

第4章 电 磁 学

§4.1 电磁的源与场

在自然界中,物质之间存在着四种相互作用,其中之一称为电磁相互作用,能产生电磁相互作用的物质称为电磁性物质.

电磁相互作用的机理是:凡电磁性物质均带有着电磁的荷,而这种电磁荷运动时,又形成了电磁的流;电磁的荷或流在时空中激发出一种场,称为电磁场;而电磁场又会反过来对处于其中的电磁荷及流产生作用力.这样,具有电磁性的物质之间就产生了电磁相互作用.

电磁理论的基本规律是从实践中总结出来的.如库仑定律、毕奥-萨伐尔定律、安培定律、法拉第电磁感应定律.后来麦克斯韦集这些实验定律的大成,并通过逻辑推理提出了涡旋电场与位移电流的假说,总结成了麦克斯韦方程组,从而全面地描述了电磁的荷与流产生电磁场的规律.另一方面人们也总结出了电磁场对电磁的荷与流产生作用力的规律,称为洛伦兹力公式.

狭义相对论认为,电磁规律应满足爱因斯坦相对性原理,因此电磁场以及激发电磁场的源均应是时空中的四物理量,它们之间也必可以用四元数形式的方程相联系.

一、四电磁源

假定物质静止时单位体积内带有着电磁荷 ρ_0,称为荷的体密度.若该物质运动的四速度为 $V=\mathrm{i}c\gamma+\gamma\boldsymbol{v}$,那么四电磁源的体密度为

$$J=\rho_0 V=\mathrm{i}c\rho+\boldsymbol{j}. \tag{4.1.1}$$

其标部中的 ρ 和矢部 $\boldsymbol{j}$ 分别是电磁荷和电磁流,有

$$\begin{cases}\rho=\gamma\rho_0,\\ \boldsymbol{j}=\gamma\rho_0\boldsymbol{v}=\rho\boldsymbol{v}.\end{cases} \tag{4.1.2}$$

由四速度的洛伦兹变换 $V'=M^{\dagger}VM$ 知,四电磁源的洛伦兹变换为

$$J'=M^{\dagger}JM. \tag{4.1.3}$$

二、四电磁场

在现行的电磁理论中,电磁场用两个三维空间矢量 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 来表示,两者能够

构成一个二阶反对称张量

$$\begin{bmatrix} 0 & \mu_0 H_z & -\mu_0 H_y & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_x \\ -\mu_0 H_z & 0 & \mu_0 H_x & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_y \\ \mu_0 H_y & -\mu_0 H_x & 0 & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_z \\ \frac{\mathrm{i}}{c}E_x & \frac{\mathrm{i}}{c}E_y & \frac{\mathrm{i}}{c}E_z & 0 \end{bmatrix}$$

这既表明了电场和磁场有着内在的联系，又由此证明了电磁规律是满足爱因斯坦的普遍相对性原理.

直接从狭义相对论的时空观念出发，可以预料电磁场也能够用一个四物理量来描述. 记四电磁场为

$$G = \mathrm{i}cg_0 + \boldsymbol{g}. \tag{4.1.4}$$

源激发场的规律当然应通过实践来寻找，但麦克斯韦的电磁理论已经指明，场的时空导数与源成比例，因此推测：在真空中，四电磁场的四梯度与四电磁源成正比

$$\Box G = \mu_0 J. \tag{4.1.5}$$

其比例常数 μ_0 取决于场 G 和源 J 量度单位的选取. 运算符号 $\Box$ 是时空的四梯度算子

$$\Box = -\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \nabla. \tag{4.1.6}$$

四梯度算子 $\Box$ 的主要性质概括为：几种共轭的算子是

$$\begin{cases} \widetilde{\Box} = -\Box^{*} = -\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \nabla, \\ \Box^{\dagger} = -\Box = \frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \nabla. \end{cases} \tag{4.1.7}$$

他们的模方均相同，为

$$\| \Box \| = \nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}, \tag{4.1.8}$$

即达朗贝尔算子. 在惯性参考系间进行洛伦兹变换的性质是

$$\Box' = M^{\dagger}\Box M. \tag{4.1.9}$$

其中的变换四元数 M 就是(2.2.10)和(2.2.13)式.

四电磁场方程(4.1.5)应该满足爱因斯坦相对性原理，在另一个惯性参考系中的形式应相同

$$\Box' G' = \mu_0 J'.$$

因此由(4.1.3)和(4.1.9)式有

$$\mu_0 J' = \mu_0 M^{\dagger} J M = M^{\dagger}(\square G)M = M^{\dagger}\square M\widetilde{M}GM.$$

所以得到四电磁场的洛伦兹变换

$$G' = \widetilde{M}GM. \tag{4.1.10a}$$

其分量形式则是

$$\begin{cases} g_0' = g_0, \\ \boldsymbol{g}' = \gamma\boldsymbol{g} - (\gamma-1)(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{e})\boldsymbol{e} + \mathrm{i}\gamma\beta\boldsymbol{g}\times\boldsymbol{e}. \end{cases} \tag{4.1.10b}$$

表明四电磁场的标部 $G_S=\mathrm{i}cg_0$ 是洛伦兹不变量.

三、电场和磁场

电磁场方程应该具有普遍性,因此四电磁的源和场的每一个分量都应该是复的,即

$$\begin{cases} J = \mathrm{i}c\left(\rho_e + \dfrac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\rho_m\right) + \boldsymbol{j}_e + \dfrac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\boldsymbol{j}_m, & (4.1.11) \\ G = \mu_0 h - \dfrac{\mathrm{i}}{c}e + \mu_0\boldsymbol{H} - \dfrac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}. & (4.1.12) \end{cases}$$

其中,ρ_e 和 ρ_m 分别是电荷和磁荷密度,$\boldsymbol{j}_e$ 和 $\boldsymbol{j}_m$ 分别是电流和磁流密度,$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别是电场和磁场强度,而 e 和 h 则分别是四电磁场标部中的虚部和实部.

把(4.1.11)和(4.1.12)式代入场方程(4.1.5),并展开

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \nabla\right)\left(\mu_0 h - \frac{\mathrm{i}}{c}e + \mu_0\boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right) \\ &= -\frac{\mathrm{i}\mu_0}{c}\frac{\partial h}{\partial t} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial e}{\partial t} - \mu_0\nabla\cdot\boldsymbol{H} + \frac{\mathrm{i}}{c}\nabla\cdot\boldsymbol{E} \\ &\quad + \mu_0\nabla h - \frac{\mathrm{i}}{c}\nabla e - \mathrm{i}\frac{\mu_0}{c}\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} + \mu_0\nabla\times\boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\nabla\times\boldsymbol{E} \\ &= \mathrm{i}c\mu_0\rho_e - \rho_m + \mu_0\boldsymbol{j}_e + \frac{\boldsymbol{i}}{c}\boldsymbol{j}_m. \end{aligned}$$

得到了分量形式的电磁场方程

$$\begin{cases} \nabla\cdot\boldsymbol{E} - \mu_0\dfrac{\partial h}{\partial t} = \dfrac{\rho_e}{\varepsilon_0}, \\ \nabla\cdot\boldsymbol{H} + \varepsilon_0\dfrac{\partial e}{\partial t} = \dfrac{\rho_m}{\mu_0}, \\ \nabla\times\boldsymbol{E} + \mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t} + \nabla e = -\boldsymbol{j}_m, \\ \nabla\times\boldsymbol{H} - \varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} + \nabla h = \boldsymbol{j}_e. \end{cases} \tag{4.1.13}$$

其中常数 $\varepsilon_0 = \dfrac{1}{c^2\mu_0}$. 同时由(4.1.10b)式得到了电场和磁场的洛伦兹变换

$$\begin{cases} \boldsymbol{E}' \cdot \boldsymbol{e} = \boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{e}, \\ \boldsymbol{E}' \cdot \boldsymbol{e}_\perp = \gamma[\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{e}_\perp - \mu_0 u \boldsymbol{H} \cdot (\boldsymbol{e} \times \boldsymbol{e}_\perp)], \\ \boldsymbol{H}' \cdot \boldsymbol{e} = \boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{e}, \\ \boldsymbol{H}' \cdot \boldsymbol{e}_\perp = \gamma[\boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{e}_\perp + \varepsilon_0 u \boldsymbol{E} \cdot (\boldsymbol{e} \times \boldsymbol{e}_\perp)]. \end{cases} \tag{4.1.14}$$

上式表明,所谓的电场和磁场是会因参考系的变化而发生转换的,但是从四电磁源的洛伦兹变换却表明,当参考系变换时虽然四电磁源的标部和矢部之间会发生转换,但是其中的电性的源 $\rho_e, \boldsymbol{j}_e$ 和磁性的源 $\rho_m, \boldsymbol{j}_m$ 之间却不会发生转换.

四、场对源的作用力

四电磁场 G 对处于其中的四电磁源 J 作用的四元力密度从理论上推测应为

$$F = \frac{1}{2}(G^\dagger J - J^\dagger G). \tag{4.1.15}$$

之所以推测为两项之和是因为两个四物理量相乘不具有交换性,故让两种次序的乘积各占一半的权重.

推测出(4.1.15)式的另一个原因是它的洛伦兹协变性.这是因为

$$(G^\dagger J)' = M^\dagger G^\dagger M^* M^\dagger JM = M^\dagger (G^\dagger J) M,$$

$$(J^\dagger G)' = M^\dagger J^\dagger M \widetilde{M} GM = M^\dagger (J^\dagger G) M.$$

和

$$F' = M^\dagger FM.$$

所以在不同的惯性参考系中(4.1.15)式的形式不变.将(4.1.15)式展开得

$$\begin{aligned} F = & \frac{1}{2}[-(\mathrm{i}cg_0^* + \boldsymbol{g}^*)(\mathrm{i}c\rho + \boldsymbol{j}) + (\mathrm{i}c\rho^* + \boldsymbol{j}^*)(\mathrm{i}cg_0 + \boldsymbol{g})] \\ = & \frac{1}{2}[c^2(\rho g_0^* - \rho^* g_0) + \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{g}^* - \boldsymbol{j}^* \cdot \boldsymbol{g} \\ & + \mathrm{i}c(\rho^* \boldsymbol{g} - \rho \boldsymbol{g}^*) + \mathrm{i}c(g_0 \boldsymbol{j}^* - g_0^* \boldsymbol{j}) + \boldsymbol{j}^* \times \boldsymbol{g} - \boldsymbol{g}^* \times \boldsymbol{j}]. \end{aligned}$$

再把(4.1.11)和(4.1.12)式代入上式得到

$$\begin{aligned} F = & \mathrm{i}c(\mu_0 \rho_e h - \varepsilon_0 \rho_m e) + \frac{\mathrm{i}}{c}(\boldsymbol{j}_e \cdot \boldsymbol{E} + \boldsymbol{j}_m \cdot \boldsymbol{H}) \\ & + \mu_0 h \boldsymbol{j}_e - \varepsilon_0 e \boldsymbol{j}_m + \rho_e \boldsymbol{E} + \rho_m \boldsymbol{H} + \mu_0 \boldsymbol{j}_e \times \boldsymbol{H} - \varepsilon_0 \boldsymbol{j}_m \times \boldsymbol{E}. \end{aligned} \tag{4.1.16}$$

在前一章中已经证明,四元力的标部和矢部必然存在着关系式

$$F_{\mathrm{S}} = \frac{\mathrm{i}}{c} \boldsymbol{v} \cdot F_{\mathrm{V}}.$$

由(4.1.16)式知

$$F_{\mathrm{S}} = \mathrm{i}c(\mu_0 \rho_e h - \varepsilon_0 \rho_m e) + \frac{\mathrm{i}}{c}(\boldsymbol{j}_e \cdot \boldsymbol{E} + \boldsymbol{j}_m \cdot \boldsymbol{H}),$$

$$\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot F_{\mathrm{V}}=\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot(\mu_0 h\boldsymbol{j}_e-\varepsilon_0 e\boldsymbol{j}_m)+\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot(\rho_e\boldsymbol{E}+\rho_m\boldsymbol{H}).$$

消去相同的项后得到

$$(c^2-v^2)(\mu_0\rho_e h-\varepsilon_0\rho_m e)=0.$$

由于荷载着电荷 ρ_e、磁荷 ρ_m 的物质的速度 v 不可能达到时空当量 c，因此必定有

$$\mu_0\rho_e h-\varepsilon_0\rho_m e=0. \tag{4.1.17}$$

此式一方面表明了电荷磁荷密度与他们所产生的四电磁场的标部存在着一个制约关系，另一方面也使场对源的作用力密度((4.1.16)式)简化成了

$$F=\frac{\mathrm{i}}{c}(\boldsymbol{j}_e\cdot\boldsymbol{E}+\boldsymbol{j}_m\cdot\boldsymbol{H})+\rho_e\boldsymbol{E}+\rho_m\boldsymbol{H}+\mu_0\boldsymbol{j}_e\times\boldsymbol{H}-\varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\times\boldsymbol{E}. \tag{4.1.18}$$

它与四电磁场的标部 e 和 h 无关. 这就是在假定磁荷存在情况下的洛伦兹力密度的公式.

§4.2 电磁场的波动方程

一、电磁势

电磁场可以用另一种物理量来描述，称作**电磁势**. 四电磁势用

$$A=\frac{\mathrm{i}}{c}\varphi+\boldsymbol{a} \tag{4.2.1}$$

表示，其标部中的 φ 称为电磁标势，其矢部 $\boldsymbol{a}$ 称为电磁矢势. 它们普遍地都是复的，写成

$$\begin{cases}\varphi=\varphi_e+\mathrm{i}c\mu_0\varphi_m,\\ \boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}_e+\mathrm{i}c\mu_0\boldsymbol{a}_m.\end{cases} \tag{4.2.2}$$

由场来定义出势

$$G=\square^{*}A. \tag{4.2.3a}$$

把(4.2.1)和(4.2.2)式代入(4.2.3a)式并展开得

$$\begin{aligned}\mu_0 h-\frac{\mathrm{i}}{c}e+\mu_0\boldsymbol{H}-\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}&=\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t}+\nabla\right)\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\varphi_e-\mu_0\varphi_m+\boldsymbol{a}_e+\mathrm{i}c\mu_0\boldsymbol{a}_m\right)\\&=-\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi_e}{\partial t}-\frac{\mathrm{i}\mu_0}{c}\frac{\partial\varphi_m}{\partial t}-\nabla\cdot\boldsymbol{a}_e-\mathrm{i}c\mu_0\nabla\cdot\boldsymbol{a}_m\\&\quad+\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial\boldsymbol{a}_e}{\partial t}-\mu_0\frac{\partial\boldsymbol{a}_m}{\partial t}+\frac{\mathrm{i}}{c}\nabla\varphi_e-\mu_0\nabla\varphi_m+\nabla\times\boldsymbol{a}_e+\mathrm{i}c\mu_0\nabla\times\boldsymbol{a}_m.\end{aligned}$$

得到(4.2.3a)式的分量形式

$$\begin{cases}\mu_0 h = -\nabla \cdot \boldsymbol{a}_e - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial \varphi_e}{\partial t}, \\ \varepsilon_0 e = \nabla \cdot \boldsymbol{a}_m + \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial \varphi_m}{\partial t}, \\ \boldsymbol{E} = -\nabla \varphi_e - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_e}{\partial t} - \dfrac{1}{\varepsilon_0}\nabla \times \boldsymbol{a}_m, \\ \boldsymbol{H} = -\nabla \varphi_m - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_m}{\partial t} + \dfrac{1}{\mu_c}\nabla \times \boldsymbol{a}_e. \end{cases} \tag{4.2.3b}$$

用(4.2.3a)式从场来定义势并未能把势完全确定下来，因为任取一个满足达朗贝尔方程的时空函数 ψ，有

$$\|\Box\|\psi = \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi = 0.$$

由于

$$\Box^{\cdot}(A - \Box\psi) = \Box^{\cdot} A + \|\Box\|\psi = \Box^{\cdot} A.$$

因此，用 A 还是用 $A - \Box\psi$ 作为电磁势，对场不会造成任何影响. 也就是说，表达同一个电磁场的电磁势可以相差到任一个满足达朗贝尔方程的函数的四梯度.

二、势的波动方程

用算子 $-\Box$ 作用于(4.2.3a)式的两端，有

$$-\Box G = -\Box\,\Box^{\cdot} A = \|\Box\| A.$$

由电磁场方程((4.1.5)式)得到电磁势应满足二阶导数型的波动方程

$$\|\Box\| A = -\mu_0 J. \tag{4.2.4a}$$

其分量方程则是

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\begin{bmatrix}\varphi_e \\ \boldsymbol{a}_e \\ \varphi_m \\ \boldsymbol{a}_m\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}\dfrac{\rho_e}{\varepsilon_0} \\ \mu_0 \boldsymbol{j}_e \\ \dfrac{\rho_m}{\mu_0} \\ \varepsilon_0 \boldsymbol{j}_m\end{bmatrix} \tag{4.2.4b}$$

与现行的电磁理论作对比：在现行的电磁理论中，电磁势是由(4.2.3b)式的后两式定义的. 为了导出电磁势所满足的波动方程，需要在标势 φ 和矢势 $\boldsymbol{a}$ 之间规定一个制约关系，称为规范. 不同的规范将导致不同形式的势的方程. 通常选择的规范是

$$\nabla \cdot \boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \tag{4.2.5}$$

称为**洛伦兹规范**，或称为**洛伦兹条件**. 在选取洛伦兹规范后也导出了形如(4.2.4b)

式的波动方程.

从四元数电磁理论导出电磁势的波动方程(4.2.4b)时,除了电磁场方程(4.1.5)尚带有推测性外,不再附加任何人为的条件,而现行的电磁理论所作的洛伦兹规范,从四元数电磁理论来看实际上就是把四电磁场 G 的标部

$$G_S = \mathrm{i}cg_0 = \mu_0 h - \frac{\mathrm{i}}{c}e$$

人为地规定成了 0,不再留下任何讨论的余地. 然而在四元数的电磁理论中,G_S 的取值还是应该进一步讨论的.

三、场的二阶导数波动方程

电磁场方程(4.1.5)是一阶导数的. 用算子 $\widetilde{\Box}$ 作用于它的两端,导出了电磁场 G 所满足的二阶导数波动方程

$$\widetilde{\Box}\,\Box G = \|\Box\| G = \mu_0 \widetilde{\Box} J. \tag{4.2.6}$$

展开上式的右端,则

$$\begin{aligned}
\widetilde{\Box} J = &-\left(\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \nabla\right)\left(\mathrm{i}c\rho_e - \frac{1}{\mu_0}\rho_m + \boldsymbol{j}_e + \frac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\boldsymbol{j}_m\right) \\
= &\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \frac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j}_e + \frac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\nabla\cdot\boldsymbol{j}_m \\
&- \frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial \boldsymbol{j}_e}{\partial t} + \varepsilon_0\frac{\partial \boldsymbol{j}_m}{\partial t} - \mathrm{i}c\,\nabla\rho_e + \frac{1}{\mu_0}\nabla\rho_m - \nabla\times\boldsymbol{j}_e - \frac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\nabla\times\boldsymbol{j}_m.
\end{aligned}$$

所以(4.2.6)式的分量形式是

$$\begin{cases}
\left(\nabla^2 - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}\right)e = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_m - \dfrac{\partial \rho_m}{\partial t}, \\
\left(\nabla^2 - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}\right)h = \nabla\cdot\boldsymbol{j}_e + \dfrac{\partial \rho_e}{\partial t}, \\
\left(\nabla^2 - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{E} = \dfrac{1}{\varepsilon_0}\nabla\rho_e + \mu_0\dfrac{\partial \boldsymbol{j}_e}{\partial t} + \nabla\times\boldsymbol{j}_m, \\
\left(\nabla^2 - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{H} = \dfrac{1}{\mu_0}\nabla\rho_m + \varepsilon_0\dfrac{\partial \boldsymbol{j}_m}{\partial t} - \nabla\times\boldsymbol{j}_e.
\end{cases} \tag{4.2.7}$$

(4.2.6)和(4.2.7)式表明,只要推测的电磁场方程(4.1.5)是正确的,那么电磁波传播的速度就是时空当量 c. 速度是时空当量 c 时,就不会因惯性参考系的变换而变化,于是电磁波速在不同的惯性参考系中保持不变就是电磁理论的必然结论. 也由此得到,只要测量出真空中的光速,也就知道了时空当量 c.

四、电磁场方程的实践检验

从实践中总结出来的电磁场方程是麦克斯韦方程组,把推测出的电磁场方程

(4.1.5)与麦克斯韦方程组对照,得到以下认识:

(1) 四电磁场 G 的四梯度与四电磁源 J 的比例常数

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\ \mathrm{N/A^2}.$$

它就是真空的磁导率,而 $\varepsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 c^2}$ 就是真空的介电常数,其中 c 是时空当量,由测量真空中的光速而知晓.

(2) 四电磁场 G 标部中的 e 和 h 满足

$$\begin{cases}\dfrac{\partial e}{\partial t} = \dfrac{\partial h}{\partial t} = 0,\\ \nabla e = \nabla h = 0.\end{cases} \tag{4.2.8}$$

即 e 和 h 是与时空位置无关的常数.

(3) 从而电荷和磁荷是守恒的

$$\begin{cases}\nabla \cdot \boldsymbol{j}_e + \dfrac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0,\\ \nabla \cdot \boldsymbol{j}_m + \dfrac{\partial \rho_m}{\partial t} = 0.\end{cases} \tag{4.2.9}$$

四元数电磁理论指出电、磁荷守恒的规律只是电磁场方程的推论之一,这样就把建立电磁理论所要依据的实验规律减少到了最低程度,同时也就让人们获知了不同的实验定律之间的内在联系.

§4.3　电磁场的能量和动量

电流元之间相互作用力的规律——安培定律是电磁理论的主要实验依据之一. 电流元 $I_1 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_1$ 对 $I_2 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_2$ 的作用力和 $I_2 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_2$ 对 $I_1 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_1$ 的作用力分别为

$$\boldsymbol{f}_{21} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I_2 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_2 \times [I_1 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_1 \times (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)]}{|\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1|^3},$$

$$\boldsymbol{f}_{12} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I_1 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_1 \times [I_2 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_2 \times (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)]}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^3}.$$

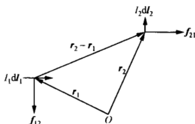


图 4.1

图 4.1 明显地示意了 $\boldsymbol{f}_{21}$ 与 $\boldsymbol{f}_{12}$ 并非反向. 难道是牛顿第三定律在电磁规律中并不适用? 否! 这一问题启发了人们不能撇开电磁场而孤立地去考察电流元,因为电磁场也是具有能量和动量的.

一、场的能量和能流密度

考察四物理量

$$S=\frac{\mathrm{i}c}{2\mu_0}G^{\dagger}G. \tag{4.3.1}$$

把右端乘开为

$$\begin{aligned}S&=\frac{\mathrm{i}c}{2\mu_0}\left(\mu_0 h+\frac{\mathrm{i}}{c}e-\mu_0\boldsymbol{H}-\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\left(\mu_0 h-\frac{\mathrm{i}}{c}e+\mu_0\boldsymbol{H}-\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\\&=\frac{\mathrm{i}c}{2}(\mu_0 h^2+\varepsilon_0 e^2+\mu_0 H^2+\varepsilon_0 E^2)+h\boldsymbol{E}-e\boldsymbol{H}+\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}\\&=\mathrm{i}c(u_0+u)+\boldsymbol{S}_0+\boldsymbol{S}.\end{aligned} \tag{4.3.2}$$

其中

$$\begin{cases}u_0=\dfrac{1}{2}(\varepsilon_0 e^2+\mu_0 h^2),\\ \boldsymbol{S}_0=h\boldsymbol{E}-e\boldsymbol{H}.\end{cases} \tag{4.3.3}$$

和

$$\begin{cases}u=\dfrac{1}{2}(\varepsilon_0 E^2+\mu_0 H^2),\\ \boldsymbol{S}=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}.\end{cases} \tag{4.3.4}$$

用算子$\widetilde{\square}$作用于(4.3.2)式，考察其标部

$$\begin{aligned}(\widetilde{\square}S)_{\mathrm{S}}&=\left[\left(-\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\nabla\right)(\mathrm{i}cu_0+\mathrm{i}cu+\boldsymbol{S}_0+\boldsymbol{S})\right]_{\mathrm{S}}\\&=\nabla\cdot\boldsymbol{S}_0+\frac{\partial u_0}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}+\frac{\partial u}{\partial t}.\end{aligned}$$

把电磁场方程(4.1.13)式代入上式，因 e 和 h 是与时空无关的常数，故得

$$\nabla\cdot\boldsymbol{S}_0+\frac{\partial u_0}{\partial t}=h\nabla\cdot\boldsymbol{E}-e\nabla\cdot\boldsymbol{H}=h\frac{\rho_e}{\varepsilon_0}-e\frac{\rho_m}{\mu_0}=0, \tag{4.3.5}$$

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{S}+\frac{\partial u}{\partial t}&=\mu_0\boldsymbol{H}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t}+\varepsilon_0\boldsymbol{E}\cdot\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}+(\nabla\times\boldsymbol{E})\cdot\boldsymbol{H}-\boldsymbol{E}\cdot\nabla\times\boldsymbol{H}\\&=-\boldsymbol{j}_e\cdot\boldsymbol{E}-\boldsymbol{j}_m\cdot\boldsymbol{H}=-\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}.\end{aligned} \tag{4.3.6}$$

(4.3.6)式是电磁场具有能量以及能量随着电磁波的传播而传播的体现. 其右端的项 $\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}$ 是电磁场对处于场中的带有电磁源的物质单位时间内所作功的体密度，因此根据能量守恒原理，$\frac{\partial u}{\partial t}$应是电磁场单位时间内所具能量密度的增加，而 $\nabla\cdot\boldsymbol{S}$ 则是单位时间内通过单位体积表面由内向外流出的电磁场的能量. 所以(4.3.4)式中的 u 是电磁场的能量密度，$\boldsymbol{S}$ 是电磁场的能流密度，而(4.3.1)式中的 S 称为电磁场的四能流密度.

二、场的动量和动量流密度

用 $\boldsymbol{n}$ 表示三维空间中任一固定方向的单位矢量，考察四物理量

$$\Psi_n = \frac{1}{2\mu_0} G^{\dagger} \boldsymbol{n} G. \tag{4.3.7}$$

由

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}G &= \boldsymbol{n}\left(\mu_0 h - \frac{\mathrm{i}}{c}e + \mu_0 \boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right) \\ &= -\left(\mu_0 \boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\cdot \boldsymbol{n} + \left(\mu_0 h - \frac{\mathrm{i}}{c}e\right)\boldsymbol{n} + \boldsymbol{n}\times\left(\mu_0 \boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned}\Psi_n &= \frac{1}{2\mu_0}\left[\left(\mu_0 h + \frac{\mathrm{i}}{c}e\right) - \left(\mu_0 \boldsymbol{H} + \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\right]\left[-\left(\mu_0 \boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\cdot \boldsymbol{n}\right. \\ &\quad \left. + \left(\mu_0 h - \frac{\mathrm{i}}{c}e\right)\boldsymbol{n} + \boldsymbol{n}\times\left(\mu_0 \boldsymbol{H} - \frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E}\right)\right] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{c}(h\boldsymbol{E} - e\boldsymbol{H} - \boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\cdot\boldsymbol{n} + \frac{1}{2}(\varepsilon_0 e^2 + \mu_0 h^2 - \varepsilon_0 E^2 - \mu_0 H^2)\boldsymbol{n} \\ &\quad - (\varepsilon_0 e\boldsymbol{E} + \mu_0 h\boldsymbol{H})\times\boldsymbol{n} + \varepsilon_0(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{E} + \mu_0(\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{H} \\ &= \mathrm{i}c\boldsymbol{\psi}_0\cdot\boldsymbol{n} + \boldsymbol{\psi}_{n0} - \mathrm{i}c\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n} - \boldsymbol{\psi}_n.\end{aligned} \tag{4.3.8}$$

其中

$$\begin{cases}\boldsymbol{\psi}_0 = \dfrac{1}{c^2}(h\boldsymbol{E} - e\boldsymbol{H}) = \dfrac{1}{c^2}\boldsymbol{S}_0, \\ \boldsymbol{\psi}_{n0} = u_0\boldsymbol{n} - (\varepsilon_0 e\boldsymbol{E} + \mu_0 h\boldsymbol{H});\end{cases} \tag{4.3.9}$$

$$\begin{cases}\boldsymbol{\psi} = \dfrac{1}{c^2}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H} = \dfrac{1}{c^2}\boldsymbol{S}, \\ \boldsymbol{\psi}_n = u\boldsymbol{n} - \Gamma\varepsilon_0(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{E} + \mu_0(\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{H}.\end{cases} \tag{4.3.10}$$

用算子$\widetilde{\square}$作用于(4.3.8)式的两端，考察其标部

$$\begin{aligned}(\widetilde{\square}\Psi_n)_S &= \left[\left(-\frac{\mathrm{i}}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \nabla\right)(\mathrm{i}c\boldsymbol{\psi}_0\cdot\boldsymbol{n} + \boldsymbol{\psi}_{n0} - \mathrm{i}c\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n} - \boldsymbol{\psi}_n)\right]_S \\ &= \nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_{n0} + \frac{\partial(\boldsymbol{\psi}_0\cdot\boldsymbol{n})}{\partial t} - \nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_n - \frac{\partial(\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n})}{\partial t}.\end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_{n0} + \frac{\partial(\boldsymbol{\psi}_0\cdot\boldsymbol{n})}{\partial t} &= -\left[\varepsilon_0 e\left(\nabla\times\boldsymbol{E} + \mu_0\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t}\right) + \mu_0 h\left(\nabla\times\boldsymbol{H} - \varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right)\right]\cdot\boldsymbol{n} \\ &= (\varepsilon_0 e\boldsymbol{j}_m - \mu_0 h\boldsymbol{j}_e)\cdot\boldsymbol{n} = 0;\end{aligned} \tag{4.3.11}$$

和

$$\begin{aligned}-\nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_n - \frac{\partial(\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n})}{\partial t} &= (\rho_e\boldsymbol{E} + \rho_m\boldsymbol{H} + \mu_0\boldsymbol{j}_e\times\boldsymbol{H} - \varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\times\boldsymbol{E})\cdot\boldsymbol{n} \\ &= \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{n}.\end{aligned} \tag{4.3.12}$$

(4.3.12)式的右端 $\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{n}$ 是电磁场对处于场中单位体积内带有电磁源的物质在 $\boldsymbol{n}$

方向所施加的作用力，因此根据动量原理，左端的项$\frac{\partial(\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{n})}{\partial t}$就是电磁场在单位体积内所具有的$\boldsymbol{n}$方向动量的增加率，而项$\nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_n$是单位时间内通过该单位体积表面由内向外流出的电磁场的$\boldsymbol{n}$方向动量. 于是量$\boldsymbol{\psi}$是电磁场的动量密度，$\boldsymbol{\psi}_n$是电磁场在$\boldsymbol{n}$方向动量的流密度，而Ψ_n则是电磁场$\boldsymbol{n}$方向动量的四动量流密度.

归纳上述各式，电磁场对电磁源所施加的四洛伦兹力的密度可以只用场量表示成

$$\begin{aligned}F&=\frac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}+\boldsymbol{f}\\&=\frac{1}{2\mu_0}[(\widetilde{\Box}G^{\dagger}G)_{\mathrm{S}}+(\widetilde{\Box}G^{\dagger}\boldsymbol{i}G)_{\mathrm{S}}\boldsymbol{i}+(\widetilde{\Box}G^{\dagger}\boldsymbol{j}G)_{\mathrm{S}}\boldsymbol{j}+(\widetilde{\Box}G^{\dagger}\boldsymbol{k}G)_{\mathrm{S}}\boldsymbol{k}].\end{aligned}\tag{4.3.13}$$

§4.4 电磁场的推迟形式

一、势方程的积分形式

电磁势波动方程的微分形式是

$$\|\Box\|A=-\mu_0 J.\tag{4.4.1}$$

它的积分形式是

$$A(R)=\frac{\mu_0}{4\pi}\iiint_{V'}\frac{J(R')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'.\tag{4.4.2}$$

其中积分的空间区域V'是与四位置R的间隔$\|R'-R\|=0$的区域，称为**类光区域**，即

$$t'=t+\frac{K}{c}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|,\quad K=\pm 1.\tag{4.4.3}$$

(4.4.2)式中的各个分量是

$$\begin{cases}\varphi_e(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\frac{\rho_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z',\\ \boldsymbol{a}_e(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{\mu_0}{4\pi}\displaystyle\iiint\frac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z',\\ \varphi_m(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\mu_0}\displaystyle\iiint\frac{\rho_m(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z',\\ \boldsymbol{a}_m(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{\varepsilon_0}{4\pi}\displaystyle\iiint\frac{\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'.\end{cases}\tag{4.4.4}$$

对于(4.4.2)或(4.4.4)式取其中的一个分量来加以验证. 由

$$\nabla\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{K}{c}\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\frac{\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|};$$

$$\nabla^2\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+2[\nabla\rho(\boldsymbol{r}',t')]\cdot\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla^2\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+2\frac{K}{c}\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}(\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\cdot\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$+\frac{K}{c}\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\frac{\nabla^2|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{K^2}{c^2}\frac{\partial^2\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t^2}\frac{(\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$=-4\pi\rho(\boldsymbol{r}',t')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')+\frac{K^2}{c^2}\frac{\partial^2\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t^2}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.$$

故得

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=-4\pi\rho(\boldsymbol{r}',t')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}').$$

上述运算中应用了

$$\begin{cases}(\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\cdot\nabla\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=-\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2},\\ \dfrac{\nabla^2|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\dfrac{2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2},\\ (\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)^2=(\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)\cdot(\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)=1,\\ K^2=1.\end{cases}$$

这样

$$\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\varphi_e(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\iiint\left(\nabla^2-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t}\right)\frac{\rho_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'=-\frac{\rho_e(\boldsymbol{r},t)}{\varepsilon_0}.$$

对于 φ_m, $\boldsymbol{a}_e$ 和 $\boldsymbol{a}_m$ 完全类似地可以验证.

电磁势(4.4.4)式中的标势 φ 和矢势 $\boldsymbol{a}$ 间还存在着联系. 计算 $\boldsymbol{a}$ 的散度

$$\nabla\cdot\boldsymbol{a}_e(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\iiint\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'.$$

由

$$\begin{cases}\nabla\cdot\dfrac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')\cdot\nabla\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\dfrac{K}{c}\dfrac{\partial\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\cdot\dfrac{\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|},\\ \nabla'\cdot\dfrac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')\cdot\nabla'\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\dfrac{\nabla'\cdot\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\\ \qquad=\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')\cdot\nabla'\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\dfrac{\nabla'_{t'}\cdot\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\\ \qquad+\dfrac{K}{c}\dfrac{\partial\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\cdot\dfrac{\nabla'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.\end{cases}$$

以上运算中,三个算子 ∇,∇' 和 $\nabla'_{t'}$ 的不同之处在于,∇ 是对 $\boldsymbol{r}$ 作用,∇' 是对 $\boldsymbol{r}'$ 作用,而

$\nabla'_{t'}$是在对$\boldsymbol{r}'$作用时应保持t'为常数. 由于

$$\nabla' \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=-\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|},\quad \nabla'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|=-\nabla|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|.$$

因此

$$\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}|}=-\nabla'\cdot\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla'_{t'}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.$$

得到

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{a}_e+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi_e}{\partial t}&=\frac{\mu_0}{4\pi}\iiint\left\{\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left[\nabla'_{t'}\cdot\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')+\frac{\partial\rho_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t'}\right]\right.\\&\quad\left.-\nabla'\cdot\frac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right\}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'\\&=\frac{\mu_0}{4\pi}\iiint_{V'}\frac{\nabla'_{t'}\cdot\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')+\frac{\partial}{\partial t'}\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'-\frac{\mu_0}{4\pi}\oiint_{S'}\frac{\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}'\\&=0.\end{aligned}$$

上式中第二个等号后面的前一项是因为电荷守恒定律而等于0,后一项是因为面积分区域S'是空间区域V'的表面,而V'已包含了所有的电磁源,所以S'上$\boldsymbol{j}_e=0$. 同样可证

$$\nabla\cdot\boldsymbol{a}_m+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi_m}{\partial t}=0.$$

所以(4.4.4)式所示的电磁势是已经满足了洛伦兹规范的.

二、场方程的积分形式

电磁场的二阶导数波动方程是

$$\|\square\|G=\mu_0\,\widetilde{\square}J. \tag{4.4.5}$$

与势方程(4.4.1)式对照知其积分形式是

$$G(R)=-\frac{\mu_0}{4\pi}\iiint_{V'}\frac{[\widetilde{\square}J(R)]_{R=R'}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'. \tag{4.4.6}$$

其积分的空间区域V'仍是类光区域. (4.4.6)式的分量形式则是

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\frac{\nabla'_{t'}\rho_e(\boldsymbol{r}',t')+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}-\varepsilon_0\nabla'_{t'}\times\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z',\\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=-\dfrac{1}{4\pi\mu_0}\displaystyle\iiint\frac{\nabla'_{t'}\rho_m(\boldsymbol{r}',t')+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}-\mu_0\nabla'_{t'}\times\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'.\end{cases} \tag{4.4.7}$$

由于

$$\nabla'\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla'\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$=\rho(\boldsymbol{r}',t')\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla'_{t'}\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{K}{c}\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\frac{\nabla'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|};$$

$$\nabla'\times\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=-\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')\times\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla'\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$=-\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')\times\nabla'\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{\nabla'_{t'}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\frac{K}{c}\frac{\partial\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\times\frac{\nabla'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.$$

这里,要注意的仍然是,算子 $\nabla'_{t'}$ 作用时要把宗量中的 t' 当做常数,而算子 ∇' 作用时既要对宗量中的 $\boldsymbol{r}'$ 作用,还要对宗量 t' 中的 $\boldsymbol{r}'$ 作用,由上两式得到

$$\begin{cases}\dfrac{\nabla'_{t'}\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\nabla'\dfrac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}-\rho(\boldsymbol{r}',t')\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}+\dfrac{K}{c}\dfrac{\partial\rho(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}{\partial t}\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|},\\ \dfrac{\nabla'_{t'}\times\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\nabla'\times\dfrac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}+\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')\times\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\\ \qquad+\dfrac{K}{c}\dfrac{\partial\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\times\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}.\end{cases}$$

将它们代入(4.4.7)式得到由电磁源激发电磁场规律的积分公式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=&\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\iiint\left[\rho_e(\boldsymbol{r}',t')\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}-\frac{K}{c}\frac{\partial\rho_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\right.\\&\left.-\frac{\partial\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{c^2\partial t}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'-\frac{1}{4\pi}\iiint\left[\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')\times\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\right.\\&\left.-\frac{K}{c}\frac{\partial\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\times\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z';\end{aligned}\tag{4.4.8}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=&\frac{1}{4\pi\mu_0}\iiint\left[\rho_m(\boldsymbol{r}',t')\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}-\frac{K}{c}\frac{\partial\rho_m(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\right.\\&\left.-\frac{\partial\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t')}{c^2\partial t}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'+\frac{1}{4\pi}\iiint\left[\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')\times\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^3}\right.\\&\left.-\frac{K}{c}\frac{\partial\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t')}{\partial t}\times\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\mathrm{d}z'.\end{aligned}\tag{4.4.9}$$

导出上式时应用了

$$\begin{cases}\displaystyle\iiint\nabla'\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V'=\oiint\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\boldsymbol{S}'=0,\\ \displaystyle\iiint\nabla'\times\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V'=-\oiint\frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\times\mathrm{d}\boldsymbol{S}'=0.\end{cases}$$

电磁场的积分公式(4.4.8)和(4.4.9)式也可以直接通过 $G=\Box^{*}A$ 从(4.4.4)式中推导出来,但因这一运算过程也较烦琐,故略去了.

三、推迟势或场

在电磁势的积分公式(4.4.2)和(4.4.4)式以及电磁场的积分公式(4.4.6)式

或(4.4.8)、(4.4.9)式中,时空位置 R 所处的势或场是与类光区域($\|R'-R\|=0$)中的所有 R' 处的电磁源相关联的.(4.4.3)式又表明.在类光区域中,R' 又分 $t'=t-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}<t$ 和 $t'=t+\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}>t$ 两种情况.在物理意义上两种情况有着重大的差别:$t'<t$ 意味着 $\boldsymbol{r}$ 处的势或场是与 $\boldsymbol{r}'$ 处以前的源相关,这样源是因,场是果;$t'>t$ 意味着 $\boldsymbol{r}$ 处的势或场是与 $\boldsymbol{r}'$ 处后来的源相关,这样场是因,源是果.应该使用哪一种情况呢?

事实上源与场孰是因,孰是果要视人们所考察的具体问题才能确定.当人们研究电磁的源如何激发电磁场时,应该源是因,场是果.(4.4.2)或(4.4.6)式中应使用 $t'<t$ 的情形.这时相对于源而言,场是滞后的,故名为推迟势或推迟场.推迟势或推迟场的具体形式是

$$\begin{cases}\varphi_e(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\frac{\rho_e\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{a}_e(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{\mu_0}{4\pi}\displaystyle\iiint\frac{\boldsymbol{j}_e\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{c}\right)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V',\\ \varphi_m(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\mu_0}\displaystyle\iiint\frac{\rho_m\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{a}_m(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{\varepsilon_0}{4\pi}\displaystyle\iiint\frac{\boldsymbol{j}_m\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}\right)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}V';\end{cases}\tag{4.4.10}$$

以及

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=&\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\iiint\left[\rho_e\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\frac{\partial\rho_e\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c\partial t}\frac{\boldsymbol{l}}{l^2}-\frac{\partial\boldsymbol{j}_e\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c^2\partial t}\frac{1}{l}\right]\mathrm{d}V'\\&-\frac{1}{4\pi}\iiint\left[\boldsymbol{j}_m\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\frac{\partial\boldsymbol{j}_m\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c\partial t}\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^2}\right]\mathrm{d}V',\end{aligned}\tag{4.4.11}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=&\frac{1}{4\pi\mu_0}\iiint\left[\rho_m\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\frac{\partial\rho_m\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c\partial t}\frac{\boldsymbol{l}}{l^2}-\frac{\partial\boldsymbol{j}_m\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c^2\partial t}\frac{1}{l}\right]\mathrm{d}V'\\&+\frac{1}{4\pi}\iiint\left[\boldsymbol{j}_e\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\frac{\partial\boldsymbol{j}_e\left(\boldsymbol{r}',t-\frac{l}{c}\right)}{c\partial t}\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^2}\right]\mathrm{d}V'.\end{aligned}\tag{4.4.12}$$

其中 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$.推迟形式的电磁场(4.4.11)和(4.4.12)式可以称为**广义的库仑定**

律和毕奥-萨伐尔定律.

§4.5 电磁场的同时形式

电磁场的推迟形式表明,$\boldsymbol{r}'$处的电磁源所激发的电磁场是以时空当量 c 的速度,经过了$\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c}$的时间传播至 $\boldsymbol{r}'$处的,这就否定了历史上曾经出现过的超距作用的观点.然而场与源的关系也可以用同时形式来描述.

把 $t-\frac{l}{c}$时刻的源量ρ 和$\boldsymbol{j}$ 在t 时刻作泰勒展开

$$\begin{cases}\rho\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{l}{c}\right)=\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^n\rho(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t^n}\left(-\frac{l}{c}\right)^n,\\ \dfrac{\partial\rho\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{l}{c}\right)}{\partial t}=\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^{n+1}\rho(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t^{n+1}}\left(-\frac{l}{c}\right)^n,\\ \boldsymbol{j}\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{l}{c}\right)=\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^n\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t^n}\left(-\frac{l}{c}\right)^n,\\ \dfrac{\partial\boldsymbol{j}\left(\boldsymbol{r}',t-\dfrac{l}{c}\right)}{\partial t}=\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\frac{\partial^{n+1}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t^{n+1}}\left(-\frac{l}{c}\right)^n.\end{cases}\tag{4.5.1}$$

将它们代入推迟场的公式,得到同时形式的电磁场

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\left[\rho_e(\boldsymbol{r}',t)\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\frac{\partial^n\rho_e(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^n}l^{n-3}\boldsymbol{l}\right.\\ \qquad\left.+\displaystyle\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{(n-2)!}\frac{\partial^{n-1}\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^{n-1}}l^{n-3}\right]\mathrm{d}V'\\ \qquad-\dfrac{1}{4\pi}\displaystyle\iiint\left[\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\frac{\partial^n\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^n}\times l^{n-3}\boldsymbol{l}\right]\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\mu_0}\displaystyle\iiint\left[\rho_m(\boldsymbol{r}',t)\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\frac{\partial^n\rho_m(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^n}l^{n-3}\boldsymbol{l}\right.\\ \qquad\left.+\displaystyle\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{(n-2)!}\frac{\partial^{n-1}\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^{n-1}}l^{n-3}\right]\mathrm{d}V'\\ \qquad+\dfrac{1}{4\pi}\displaystyle\iiint\left[\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}+\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\frac{\partial^n\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)}{c^n\partial t^n}\times l^{n-3}\boldsymbol{l}\right]\mathrm{d}V'.\end{cases}\tag{4.5.2}$$

对于同时形式的电磁场,可以作如下的诠释:$\boldsymbol{r}$ 处 t 时刻的电磁场由 $\boldsymbol{r}'$处同一时刻 t 的电磁源的各种时变率产生.由于电或磁的流的连续性方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

指出，荷的 $n+1$ 次时变率与流的 n 次时变率相关联，因此可以流的时变率作准，称流的 n 次时变率产生了 n 次场，而总的电磁场是由各次的场叠加而成的：

$$\begin{cases} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \sum\limits_{n=-1}^{\infty} [\boldsymbol{E}_n^{(e)}(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{E}_n^{(m)}(\boldsymbol{r},t)], \\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \sum\limits_{n=-1}^{\infty} [\boldsymbol{H}_n^{(e)}(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{H}_n^{(m)}(\boldsymbol{r},t)]. \end{cases} \tag{4.5.3}$$

其中

$$\begin{cases} \boldsymbol{E}_{-1}^{(e)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\iiint \rho_e(\boldsymbol{r}',t)\,\dfrac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{E}_{n-1}^{(e)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\dfrac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\,\dfrac{\partial^{n-1}}{c^n\partial t^{n-1}}\iiint \left[\dfrac{\partial\rho_e(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t} l^{n-3}\boldsymbol{l} + n l^{n-3}\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)\right]\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{H}_0^{(e)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi}\iiint \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)\times\dfrac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{H}_n^{(e)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi}\,\dfrac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\,\dfrac{\partial^n}{c^n\partial t^n}\iiint \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}',t)\times l^{n-3}\boldsymbol{l}\mathrm{d}V'. \end{cases}$$

(4.5.4)

和

$$\begin{cases} \boldsymbol{H}_{-1}^{(m)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi\mu_0}\iiint \rho_m(\boldsymbol{r}',t)\,\dfrac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{H}_{n-1}^{(m)}(\boldsymbol{r},t) = \dfrac{1}{4\pi\mu_0}\,\dfrac{(-1)^{n-1}}{n(n-2)!}\,\dfrac{\partial^{n-1}}{c^n\partial t^{n-1}}\iiint \left[\dfrac{\partial\rho_m(\boldsymbol{r}',t)}{\partial t} l^{n-3}\boldsymbol{l} + n l^{n-3}\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)\right]\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{E}_0^{(m)}(\boldsymbol{r},t) = -\dfrac{1}{4\pi}\iiint \boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)\times\dfrac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V', \\ \boldsymbol{E}_n^{(m)}(\boldsymbol{r},t) = -\dfrac{1}{4\pi}\,\dfrac{(-1)^{n+1}}{n(n-2)!}\,\dfrac{\partial^n}{c^n\partial t^n}\iiint \boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r}',t)\times l^{n-3}\boldsymbol{l}\mathrm{d}V'. \end{cases}$$

(4.5.5)

各次的场((4.5.4)和(4.5.5)式)满足以下关系

$$\begin{cases} \boldsymbol{E}_0^{(e)} = 0, & \boldsymbol{H}_1^{(e)} = 0, \\ \nabla\cdot\boldsymbol{E}_{-1}^{(e)} = \dfrac{\rho_e}{\varepsilon_0}, & \nabla\cdot\boldsymbol{E}_{n-1}^{(e)} = 0, \\ \nabla\cdot\boldsymbol{H}_0^{(e)} = 0, & \nabla\cdot\boldsymbol{H}_n^{(e)} = 0, \\ \nabla\times\boldsymbol{E}_{-1}^{(e)} = 0, & \nabla\times\boldsymbol{E}_{n-1}^{(e)} + \mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}_{n-2}^{(e)}}{\partial t} = 0, \\ \nabla\times\boldsymbol{H}_0^{(e)} - \varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}_{-1}^{(e)}}{\partial t} = \boldsymbol{j}_e, & \nabla\times\boldsymbol{H}_n^{(e)} - \varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}_{n-1}^{(e)}}{\partial t} = 0; \end{cases} \tag{4.5.6}$$

和

$$\begin{cases}\boldsymbol{H}_0^{(m)}=0, & \boldsymbol{E}_1^{(m)}=0,\\ \nabla\cdot\boldsymbol{H}_{-1}^{(m)}=\dfrac{\rho_m}{\mu_0}, & \nabla\cdot\boldsymbol{H}_{n-1}^{(m)}=0,\\ \nabla\cdot\boldsymbol{E}_0^{(m)}=0, & \nabla\cdot\boldsymbol{E}_n^{(m)}=0,\\ \nabla\times\boldsymbol{H}_{-1}^{(m)}=0, & \nabla\times\boldsymbol{H}_{n-1}^{(m)}-\varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}_{n-2}^{(m)}}{\partial t}=0,\\ \nabla\times\boldsymbol{E}_0^{(m)}+\mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}_{-1}^{(m)}}{\partial t}=-\boldsymbol{j}_m, & \nabla\times\boldsymbol{E}_n^{(m)}+\mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}_{n-1}^{(m)}}{\partial t}=0.\end{cases}\tag{4.5.7}$$

(4.5.4)式至(4.5.7)式中 $n=2,3,4,\cdots$. 其中(4.5.6)和(4.5.7)式表明，虽然由电荷电流和磁荷磁流激发的场最终是叠加在一起形成总的电磁场((4.5.3)式)，但是电和磁的源各自激发场的规律却是独立的，互不干扰，而且两者是完全对称的. 至今，磁单极尚未找到，因此在本节的下文中只就由电荷电流激发的电磁场来讨论.

由于场的次数与流的时变率相对应，于是可以从流的低次时变率逐步向高次时变率来讨论，这样也大致与人们对电磁规律的认识过程相一致.

(1) 电荷不随时间变化，且 $\boldsymbol{j}=0$，这时

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{E}_{-1}(\boldsymbol{r})=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\rho(\boldsymbol{r}')\,\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=0.\end{cases}\tag{4.5.8}$$

这就是静电场，人们首先发现的也就是这个库仑定律.

(2) 电流不随时间变化，即 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot\boldsymbol{j}=$常数，这时

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{E}_{-1}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\rho(\boldsymbol{r}',t)\,\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{H}_0(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi}\displaystyle\iiint\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V'.\end{cases}\tag{4.5.9}$$

(4.5.9)式的上式是库仑定律的直接推广，其适用范围是电荷最多只能随时间线性变化. 下式即是毕奥-萨伐尔定律.

如果电流并非稳恒，即 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=-\dfrac{\partial\rho}{\partial t}\neq0$，这时 $\dfrac{\varepsilon_0\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\neq0$，表明位移电流已经开始出现了.

(3) 电流随时间线性变化，即 $\dfrac{\partial\boldsymbol{j}}{\partial t}=$常数$\neq0$，这时

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{E}_{-1}(\boldsymbol{r},t)+\boldsymbol{E}_1(\boldsymbol{r},t)\\ \qquad=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\displaystyle\iiint\left[\rho(\boldsymbol{r}',t)\,\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}-\frac{1}{2}\,\frac{\partial^2\rho(\boldsymbol{r}',t)}{c^2\partial t^2}\,\frac{\boldsymbol{l}}{l}-\frac{\partial\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t)}{c^2\partial t}\,\frac{1}{l}\right]\mathrm{d}V',\\ \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{H}_0(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{4\pi}\displaystyle\iiint\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}',t)\times\frac{\boldsymbol{l}}{l^3}\mathrm{d}V'.\end{cases}\tag{4.5.10}$$

(4.5.10)式的下式是毕奥-萨伐尔定律的直接推广，其适用范围是电流最多只能随时间线性变化. 上式则表明，此时即使是推广了的库仑定律(4.5.9)式的上式也不够了，原因在于 $\mu_0 \frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} \neq 0$，表明已经存在了涡旋电场.

(4) 电流只存在较低几次时变率：

用同时形式的场积分公式只需计算少数几次场，优点是明显的. 不过在实践中，除了静电场、稳恒电场和稳恒磁场外，这种情形还未曾多见.

(5) 源和场谐变的情形：

(4.5.4)和(4.5.5)式表明，在总场的各次场中，场每高一次就增加了一个因子

$$\frac{\omega l}{c} = 2\pi \frac{l}{\lambda}.$$

其中的 ω 是角频率，λ 是波长，可以根据这个因子的大小分不同情况来处理.

a. 似稳情况：

$$2\pi \frac{l}{\lambda} \ll 1 \tag{4.5.11}$$

称为似稳条件. 似稳情况下只需计算最低次的场. 这种情形既为似稳电路中基尔霍夫方程组的建立提供了理论依据，也适用于谐变场中近区场的计算.

b. 远场情况：

$$2\pi \frac{l}{\lambda} \gg 1 \tag{4.5.12}$$

称为远场条件. 当考虑局限在较小范围内的振荡着的电荷电流源向远处辐射的电磁场时就属这种情况. 这时用场的同时形式远不如用场的推迟形式来得方便.

c. 中间情形：

介于前两种情形之间的中间状态，例如

$$2\pi \frac{l}{\lambda} \lesssim 1.$$

目前对于这种情形的讨论还不多. 可以设想，如果需要对谐变场中进行中区场的计算，那么同时形式场的公式也为考虑这类问题提供了可能性.

§4.6 磁单极之疑

磁单极是否应该存在？电磁规律对电和磁应不应该具有对称性？这是一个物理学中存在已久，至今仍然没能解决的问题. 现在，人们仍然不辞辛劳，孜孜不倦地从理论上研究磁单极，在实践中寻找着磁单极.

人们比较相信磁单极应该存在. 电磁规律将因此而具有完美的电和磁间的对

称性，而且，如果存在着磁单极，那么电荷为什么是量子化的问题也就有了答案. 可是时至今日人们却没能找到过磁单极！虽然有个别实验室曾经宣称发现过磁单极，但一直得不到人们的公认. 现行的电磁理论不得不仍然把磁单极并不存在、恒有 $\rho_m=0$，$\boldsymbol{j}_m=0$ 作为客观事实依据.

为什么磁单极不存在？本节从理论上作些分析.

电磁现象的主要规律有：电磁的源产生电磁场的方程

$$\Box G=\mu_0 J. \tag{4.6.1a}$$

电磁场对电磁源施加的作用力的密度

$$F=\frac{1}{2}(G^{\dagger}J-J^{\dagger}G). \tag{4.6.2a}$$

由电磁场引进电磁势

$$G=\Box^{*}A. \tag{4.6.3a}$$

则电磁势满足方程

$$\|\Box\|A=-\mu_0 J. \tag{4.6.4a}$$

现今的电磁理论是把电磁的源分解成电的源和磁的源，电磁场分解成电场和磁场，电磁势分解成电的势和磁的势. 即把它们分别表示成

$$\begin{cases}J=\mathrm{i}c\rho_e-\dfrac{1}{\mu_0}\rho_m+\boldsymbol{j}_e+\dfrac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\boldsymbol{j}_m,\\ G=\mu_0 h-\dfrac{\mathrm{i}}{c}e+\mu_0\boldsymbol{H}-\dfrac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{E},\\ A=\dfrac{\mathrm{i}}{c}\varphi_e-\mu_0\varphi_m+\boldsymbol{a}_e+\mathrm{i}c\mu_0\boldsymbol{a}_m.\end{cases} \tag{4.6.5}$$

这样，(4.6.1a)式至(4.6.4a)式的分量形式分别成了

$$\begin{cases}\nabla\cdot\boldsymbol{E}-\mu_0\dfrac{\partial h}{\partial t}=\dfrac{\rho_e}{\varepsilon_0},\\ \nabla\cdot\boldsymbol{H}+\varepsilon_0\dfrac{\partial e}{\partial t}=\dfrac{\rho_m}{\mu_0},\\ \nabla\times\boldsymbol{E}+\mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial t}+\nabla e=-\boldsymbol{j}_m,\\ \nabla\times\boldsymbol{H}-\varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}+\nabla h=\boldsymbol{j}_e;\end{cases} \tag{4.6.1b}$$

$$\begin{cases}\boldsymbol{f}=\rho_e\boldsymbol{E}+\rho_m\boldsymbol{H}+\mu_0\boldsymbol{j}_e\times\boldsymbol{H}-\varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\times\boldsymbol{E},\\ \dfrac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{f}=\dfrac{\mathrm{i}}{c}(\boldsymbol{j}_e\cdot\boldsymbol{E}+\boldsymbol{j}_m\cdot\boldsymbol{H}),\\ \varepsilon_0\rho_m e-\mu_0\rho_e h=0;\end{cases} \tag{4.6.2b}$$

$$\begin{cases}\mu_0 h = -\nabla\cdot\boldsymbol{a}_e - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\varphi_e}{\partial t},\\ \varepsilon_0 e = \nabla\cdot\boldsymbol{a}_m + \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\varphi_m}{\partial t},\\ \boldsymbol{E} = -\nabla\varphi_e - \dfrac{\partial\boldsymbol{a}_e}{\partial t} - \dfrac{1}{\varepsilon_0}\nabla\times\boldsymbol{a}_m,\\ \boldsymbol{H} = -\nabla\varphi_m - \dfrac{\partial\boldsymbol{a}_m}{\partial t} + \dfrac{1}{\mu_0}\nabla\times\boldsymbol{a}_e;\end{cases}\tag{4.6.3b}$$

和

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\begin{bmatrix}\varphi_e\\ \boldsymbol{a}_e\\ \varphi_m\\ \boldsymbol{a}_m\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\varepsilon_0}\rho_e\\ \mu_0\boldsymbol{j}_e\\ \dfrac{1}{\mu_0}\rho_m\\ \varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\end{bmatrix}.\tag{4.6.4b}$$

这样磁单极是否存在，ρ_m，$\boldsymbol{j}_m$ 是否恒为 0 形成了电磁规律对电和磁是否对称的问题.

然而电磁的源、场和势也可以用甲(α)和乙(β)来分解. 把电磁源分解成甲源和乙源，把电磁场分解成甲场和乙场，把电磁势分解成甲势和乙势，即

$$\begin{cases}J = \left(\mathrm{i}c\rho_\alpha - \dfrac{1}{\mu_0}\rho_\beta + \boldsymbol{j}_\alpha + \dfrac{\mathrm{i}}{c\mu_0}\boldsymbol{j}_\beta\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},\\ G = \left(\mu_0\beta_0 - \dfrac{\mathrm{i}}{c}\alpha_0 + \mu_0\boldsymbol{\beta} - \dfrac{\mathrm{i}}{c}\boldsymbol{\alpha}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},\\ A = \left(\dfrac{\mathrm{i}}{c}\varphi_\alpha - \mu_0\varphi_\beta + \boldsymbol{a}_\alpha + \mathrm{i}c\mu_0\boldsymbol{a}_\beta\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}.\end{cases}\tag{4.6.6}$$

其中的 θ 是任意与时空位置 t，$\boldsymbol{r}$ 无关的实的常数，这样电磁源、场和势分量形式的方程，即(4.6.1b)式至(4.4.4b)式将变为

$$\begin{cases}\nabla\cdot\boldsymbol{\alpha} - \mu_0\dfrac{\partial\beta_0}{\partial t} = \dfrac{\rho_\alpha}{\varepsilon_0},\\ \nabla\cdot\boldsymbol{\beta} + \varepsilon_0\dfrac{\partial\alpha_0}{\partial t} = \dfrac{\rho_\beta}{\mu_0},\\ \nabla\times\boldsymbol{\alpha} + \mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{\beta}}{\partial t} + \nabla\alpha_0 = -\boldsymbol{j}_\beta,\\ \nabla\times\boldsymbol{\beta} - \varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{\alpha}}{\partial t} + \nabla\beta_0 = \boldsymbol{j}_\alpha;\end{cases}\tag{4.6.1c}$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{f} = \rho_\alpha \boldsymbol{\alpha} + \rho_\beta \boldsymbol{\beta} + \mu_0 \boldsymbol{j}_\alpha \times \boldsymbol{\beta} - \varepsilon_0 \boldsymbol{j}_\beta \times \boldsymbol{\alpha}, \\ \dfrac{\mathrm{i}}{c} \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{f} = \dfrac{\mathrm{i}}{c} (\boldsymbol{j}_\alpha \cdot \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{j}_\beta \cdot \boldsymbol{\beta}), \\ \varepsilon_0 \rho_\beta \alpha_0 - \mu_0 \rho_\alpha \beta_0 = 0; \end{cases} \tag{4.6.2c}$$

$$\begin{cases} \mu_0 \beta_0 = -\nabla \cdot \boldsymbol{a}_\alpha - \dfrac{1}{c^2} \dfrac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t}, \\ \varepsilon_0 \alpha_0 = \nabla \cdot \boldsymbol{a}_\beta + \dfrac{1}{c^2} \dfrac{\partial \varphi_\beta}{\partial t}, \\ \boldsymbol{\alpha} = -\nabla \varphi_\alpha - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_\alpha}{\partial t} - \dfrac{1}{\varepsilon_0} \nabla \times \boldsymbol{a}_\beta, \\ \boldsymbol{\beta} = -\nabla \varphi_\beta - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_\beta}{\partial t} + \dfrac{1}{\mu_0} \nabla \times \boldsymbol{a}_\alpha; \end{cases} \tag{4.6.3c}$$

和

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \begin{bmatrix} \varphi_\alpha \\ \boldsymbol{a}_\alpha \\ \varphi_\beta \\ \boldsymbol{a}_\beta \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\varepsilon_0} \rho_\alpha \\ \mu_0 \boldsymbol{j}_\alpha \\ \dfrac{1}{\mu_0} \rho_\beta \\ \varepsilon_0 \boldsymbol{j}_\beta \end{bmatrix}. \tag{4.6.4c}$$

其他如场的能量密度和能流密度分别是

$$\begin{cases} u = \dfrac{1}{2} (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2) = \dfrac{1}{2} (\varepsilon_0 \alpha^2 + \mu_0 \beta^2), \\ \boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\beta}. \end{cases} \tag{4.6.7}$$

场的动量密度和场动量在空间任意 $\boldsymbol{n}$ 方向分量的流密度则分别是

$$\begin{cases} \boldsymbol{\psi} = \dfrac{1}{c^2} \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} = \dfrac{1}{c^2} \boldsymbol{\alpha} \times \boldsymbol{\beta}, \\ \boldsymbol{\psi}_n = \dfrac{1}{2} (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2) \boldsymbol{n} - [\varepsilon_0 (\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{E} + \mu_0 (\boldsymbol{H} \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{H}] \\ \quad = \dfrac{1}{2} (\varepsilon_0 \alpha^2 + \mu_0 \beta^2) \boldsymbol{n} - [\varepsilon_0 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{\alpha} + \mu_0 (\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{n}) \boldsymbol{\beta}]. \end{cases} \tag{4.6.8}$$

以上讨论表明，当电磁规律用甲乙场来表述时，引发的将是对甲和乙是否对称的问题，或者乙荷乙流是否恒为 0 的问题. 因此讨论电磁规律是否具有电和磁间的对称性与是否具有甲和乙之间的对称性两者是完全等效的.

电磁与甲乙之间的关系是

$$\begin{cases} \rho_\alpha = \rho_e \cos\theta + \dfrac{1}{c\mu_0} \rho_m \sin\theta, \quad \boldsymbol{j}_\alpha = \rho_\alpha \boldsymbol{v}, \\ \rho_\beta = \rho_m \cos\theta - c\mu_0 \rho_e \sin\theta, \quad \boldsymbol{j}_\beta = \rho_\beta \boldsymbol{v}; \end{cases} \tag{4.6.9}$$

$$\begin{cases}\alpha_0 = e\cos\theta + c\mu_0 h\sin\theta, & \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{E}\cos\theta + c\mu_0\boldsymbol{H}\sin\theta,\\ \beta_0 = h\cos\theta - \dfrac{1}{c\mu_0}e\sin\theta, & \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{H}\cos\theta - \dfrac{1}{c\mu_0}\boldsymbol{E}\sin\theta;\end{cases} \tag{4.6.10}$$

和

$$\begin{cases}\varphi_\alpha = \varphi_e\cos\theta + c\mu_0\varphi_m\sin\theta, & \boldsymbol{a}_\alpha = \boldsymbol{a}_e\cos\theta + c\mu_0\boldsymbol{a}_m\sin\theta,\\ \varphi_\beta = \varphi_m\cos\theta - \dfrac{1}{c\mu_0}\varphi_e\sin\theta, & \boldsymbol{a}_\beta = \boldsymbol{a}_m\cos\theta - \dfrac{1}{c\mu_0}\boldsymbol{a}_e\sin\theta.\end{cases} \tag{4.6.11}$$

倘若恒有 $\rho_m=0$,电磁规律对电和磁不对称,但是(4.6.9)式指出

$$\frac{\rho_\beta}{\rho_\alpha} = -c\mu_0\tan\theta.$$

乙荷与甲荷却按固定的比例共存,与荷载它们的客体无关,电磁规律对甲和乙却是对称的.

倘若恒有 $\rho_\beta=0$,电磁规律对甲和乙虽不对称,但是(4.6.9)式表明

$$\frac{\rho_m}{\rho_e} = c\mu_0\tan\theta.$$

磁荷与电荷却按固定的比例共存,不因荷载它们的客体不同而不同,电磁规律对电和磁却有了对称性.

以上两种电磁规律对此对称对彼不对称的情形是电磁规律采用不同的表述形式造成的,不具有实质上的物理内容,也不是人们所关心的电磁规律对电和磁是否对称的问题.人们所真正关心的是 ρ_m 不恒为0,也非恒与 ρ_e 按固定比例共存的状态是否有可能出现,这样电磁规律不仅对电和磁是对称的,对甲和乙也总是对称的,不会因电磁与甲乙之间的变换使对称性发生变更.然而这种对称性是不存在的,也即是说磁单极是不可能存在的,原因在于电磁规律对电和磁的对称性与电磁规律的宇称变换不变性相矛盾.

把电磁规律(4.6.1a)式至(4.6.4a)式作宇称变换,分别为

$$\begin{cases}-\nabla\cdot\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t) - \mu_0\dfrac{\partial h}{\partial t} = \dfrac{1}{\varepsilon_0}\rho_e(-\boldsymbol{r},t),\\ -\nabla\cdot\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t) + \varepsilon_0\dfrac{\partial e}{\partial t} = \dfrac{1}{\mu_0}\rho_m(-\boldsymbol{r},t),\\ -\nabla\times\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t) + \mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \nabla e = -\boldsymbol{j}_m(-\boldsymbol{r},t),\\ -\nabla\times\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t) - \varepsilon_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \nabla h = \boldsymbol{j}_e(-\boldsymbol{r},t);\end{cases} \tag{4.6.12}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}(-\boldsymbol{r},t) = {} & \rho_e(-\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t) + \rho_m(-\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t)\\ & + \mu_0\boldsymbol{j}_e(-\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t) - \varepsilon_0\boldsymbol{j}_m(-\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t);\end{aligned} \tag{4.6.13}$$

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t) = \nabla\varphi_e(-\boldsymbol{r},t) - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_e(-\boldsymbol{r},t)}{\partial t} + \dfrac{1}{\varepsilon_0}\nabla\times\boldsymbol{a}_m(-\boldsymbol{r},t), \\
\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t) = \nabla\varphi_m(-\boldsymbol{r},t) - \dfrac{\partial \boldsymbol{a}_m(-\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \dfrac{1}{\mu_0}\nabla\times\boldsymbol{a}_e(-\boldsymbol{r},t);
\end{cases}
\tag{4.6.14}
$$

和

$$
\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\begin{bmatrix}\varphi_e(-\boldsymbol{r},t)\\ \boldsymbol{a}_e(-\boldsymbol{r},t)\\ \varphi_m(-\boldsymbol{r},t)\\ \boldsymbol{a}_m(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\varepsilon_0}\rho_e(-\boldsymbol{r},t)\\ \mu_0\boldsymbol{j}_e(-\boldsymbol{r},t)\\ \dfrac{1}{\mu_0}\rho_m(-\boldsymbol{r},t)\\ \varepsilon_0\boldsymbol{j}_m(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}
\tag{4.6.15}
$$

在空间是对称的情况下

$$
\begin{cases}
\rho_e(-\boldsymbol{r},t) = \rho_e(\boldsymbol{r},t), \quad \boldsymbol{j}_e(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r},t), \\
\rho_m(-\boldsymbol{r},t) = \rho_m(\boldsymbol{r},t), \quad \boldsymbol{j}_m(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{j}_m(\boldsymbol{r},t).
\end{cases}
\tag{4.6.16}
$$

假定磁单极不存在，恒有 $\rho_m = 0$，$\boldsymbol{j}_m = 0$，那么电磁规律的宇称变换不变性表明，各场量具有的宇称性质是

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t), \\
\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t);
\end{cases}
\tag{4.6.17}
$$

$$
\boldsymbol{f}(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r},t);
\tag{4.6.18}
$$

和

$$
\begin{cases}
\varphi_e(-\boldsymbol{r},t) = \varphi_e(\boldsymbol{r},t), \\
\boldsymbol{a}_e(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{a}_e(\boldsymbol{r},t), \\
\varphi_m(-\boldsymbol{r},t) = \varphi_m(\boldsymbol{r},t) = 0, \\
\boldsymbol{a}_m(-\boldsymbol{r},t) = -\boldsymbol{a}_m(\boldsymbol{r},t) = 0.
\end{cases}
\tag{4.6.19}
$$

如果磁单极存在，ρ_m，$\boldsymbol{j}_m$ 非恒为 0，那么电场 $\boldsymbol{E}$、磁场 $\boldsymbol{H}$、洛伦兹力密度 $\boldsymbol{f}$ 就不具有明确的宇称性质，电磁规律也不再具有宇称变换的不变性. 这正是当初奥斯特实验时一度使物理学工作者震惊的电磁现象中难道空间不对称！而安培用分子环流假说解释了的问题.

需要说明的是当今有一些量子力学书籍中涉及上述问题的阐述方法. 量子理论无例外地都承认电磁相互作用中具有宇称守恒的性质，但却是以附加了洛伦兹条件

$$
\nabla\cdot\boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0
\tag{4.6.20}
$$

后的二阶导数的电磁势的方程

$$
\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A = 0
\tag{4.6.21}
$$

作为光子的波动方程的. 洛伦兹条件(4.6.20)和势方程(4.6.21)都具有宇称变换的不变性,于是电磁作用下宇称必然守恒,似乎与磁单极是否存在的问题没有关系,其实不然.

在量子理论中,微观带电粒子在电磁场中的波动方程是用算符

$$\begin{cases} \hat{E} - q\varphi \quad \text{代替 } \hat{E}, \\ \hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{a} \quad \text{代替 } \hat{\boldsymbol{p}} \end{cases} \tag{4.6.22}$$

而建立起来的. (4.6.22)式的替代过程事实上必须以不存在磁单极为前提. 否则,一旦存在着磁单极,电荷在由磁单极产生的电磁场中运动时(4.6.22)式的代换就根本不对,而且连应该做怎样的代换也未能解决. 所以笔者以为,现今的量子理论书籍中,在涉及电磁相互作用时,忽略了"以磁单极不存在为前提这句话". 这有可能起到了误导作用,使人们寻找磁单极的努力热情不减.

通过以上分析,结论是电磁规律中电和磁间的对称性是和电磁规律的宇称不变性相矛盾的,电磁规律的宇称不变性已为大量的实践所证实,因此磁单极是不可能存在的. (至于一根半无穷长的狄拉克弦的有限处的一端就是一个磁单极的问题,笔者以为这只是一个理论问题,实践中是不可能出现的.)

第 5 章　相对论性量子力学(Ⅰ)

§5.1　量子观念的诞生

19 世纪末叶，现在被称作经典物理学的基本规律已经为人们所掌握. 力学以牛顿三定律为基本规律，并发展出了一套分析力学的完美形式；声学则被统一于力学之中. 电磁学从个别的实验规律总结成了完备的麦克斯韦方程组，并由此预言了电磁波的存在，从而使光学统一于电磁理论之中. 热学则在四条定律的基础上建立了系统的热力学理论，而经典的统计理论则进一步把对热现象的认识奠定在了微观元过程的基础上. 经典物理学已发展得如此和谐、完美，以致当时有些物理学工作者认为，物理学当时拿不出什么来给任何希望作出伟大发现的人，绝大多数人都相信，在经典物理学的大厦建立之后，余下的就只剩下一些扫尾工作了.

然而大自然总是按照自身的规律行事. 在物理学晴朗的天空的远处，却出现了两朵令人不安的乌云. 一朵乌云就是迈克尔孙-莫雷实验的结果，它告诉人们，绝对时空观念指导下的物理学导致了地球就是绝对静止参考系的结论，于是迫使人们不得不从绝对时空观念转变成相对论时空观；另一朵乌云指的是黑体辐射实验的结果(以及与此关联的光电效应、原子光谱、固体比热等等问题)与经典物理学的根本冲突，迫使人们不得不对物理学的基本原理重新进行认识.

一、光的量子性

1. 黑体辐射

任何一个物体都会通过其表面发射电磁波而向外输出能量，对于从外界照射在其上的电磁波能量也会一部分进行吸收，一部分发生反射. 能够对照射在其上的电磁能量全部吸收的物体称为黑体. 自然界中绝对的黑体是不存在的. 然而在一个空腔的表面开一个小孔，因为从外部照射进小孔的电磁波很少再能有机会从小孔反射出去，因此空腔上的小孔就是黑体的一个很好近似.

研究黑体的辐射性能，用 $R(T)$ 表示黑体的辐射本领，其意义是温度为 T 的空腔在单位时间内，通过小孔的单位面积向外各个方向辐射出去的各种频率电磁波的能量

$$\mathrm{d}R(T)=r(\nu,T)\mathrm{d}\nu=-r(\lambda,T)\mathrm{d}\lambda. \tag{5.1.1}$$

其中 $r(\nu,T)$ 是黑体辐射出频率为 ν 的电磁波时单位频率间隔内的能量. 同样 $r(\lambda,T)$ 是黑体辐射出波长为 λ 的电磁波时单位波长间隔内的能量. 两者的关系是

$$r(\nu,T) = -r(\lambda,T)\frac{d\lambda}{d\nu} = \frac{1}{c}\lambda^2 r(\lambda,T). \tag{5.1.2}$$

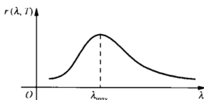


图 5.1

实验测出的结果如图 5.1 所示. 其中 λ_{max} 是曲线最大值所对应的波长

$$\left.\frac{\partial r(\lambda,T)}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=\lambda_{max}} = 0.$$

实测的结果有两条规律:

(1) **斯特藩-玻尔兹曼定律**:黑体的辐射本领与温度的四次方成正比,即

$$\sigma = \frac{R(T)}{T^4} = \frac{1}{T^4}\int_0^\infty r(\lambda,T)d\lambda = 5.670\times10^{-8}\ \frac{W}{m^2\cdot K^2}. \tag{5.1.3}$$

其中 σ 称为**斯特藩-玻尔兹曼常数**.

(2) **维恩位移定律**:使 $r(\lambda,T)$ 达到极大值的 λ 与温度成反比,即

$$\lambda_{max}\cdot T = b = 0.002898\,m\cdot K. \tag{5.1.4}$$

从物理学(力学、热学、电磁学)的理论来推导黑体辐射的规律,得到

$$r(\nu,T) = \frac{2\pi}{c^2}\nu^2\bar{\varepsilon}(\nu,T). \tag{5.1.5}$$

其中 $\bar{\varepsilon}(\nu,T)$ 是黑体辐射的每个频率为 ν 的电磁振动平均所具有的能量. 经典物理学理论认为,每个电磁振动的能量与振幅成正比,而振幅从小到大是连续分布的,因而电磁振动的能量也是连续分布的,则平均能量为

$$\bar{\varepsilon}(\nu,T) = \frac{\int_0^\infty \varepsilon e^{-\frac{\varepsilon}{KT}}d\varepsilon}{\int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{KT}}d\varepsilon} = KT. \tag{5.1.6}$$

这就是热力学中的能量均分定理:每个运动自由度上的平均动能为 $\frac{1}{2}KT$,而简谐振动的平均动能等于平均势能. (5.1.6)式应用了玻尔兹曼定律:能量为 ε 的振子数占振子总数的 $e^{-\frac{\varepsilon}{KT}}$,$K$ 是玻尔兹曼常数. 把(5.1.6)式代入(5.1.5)式得到

$$r(\nu,T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2}KT. \tag{5.1.7}$$

称为**瑞利-金斯公式**.

把理论公式与实践对照,它只在频率较低(长波段)时与实验符合,而在频率较高时与实验不符. 更加荒唐的是

$$R(T) = \int_0^\infty r(\nu,T)d\nu = \int_0^\infty \frac{2\pi}{c^2}KT\nu^2 d\nu \to \infty.$$

违反了能量守恒定律.

瑞利-金斯公式是人们集经典物理学(力学、热学、电磁学和光学)理论而导出的公式.如此完美的物理学理论,居然导出了违反客观规律的结果,所以经典物理学遇到了"紫外灾难".

普朗克在研究黑体辐射的规律时发现,如果认为每个电磁振动的能量并不是连续分布的,而总是某一个基本能量 ε_ν 的整数倍 $n\varepsilon_\nu$,而这个基本能量则与振动的频率成比例 $\varepsilon_\nu=h\nu$,那么

$$\bar{\epsilon}(\nu,t)=\frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty}n\varepsilon_\nu \mathrm{e}^{-\frac{n\varepsilon_\nu}{KT}}}{\sum\limits_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{n\varepsilon_\nu}{KT}}}=-\left[\frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{KT}\right)}\ln\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{n\varepsilon_\nu}{KT}}\right]$$

$$=-\left[\frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{KT}\right)}\ln\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\varepsilon_\nu}{KT}}}\right]=\frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{KT}\right)}\ln(1-\mathrm{e}^{-\frac{\varepsilon_\nu}{KT}})$$

$$=\frac{\varepsilon_\nu \mathrm{e}^{-\frac{\varepsilon_\nu}{KT}}}{1-\mathrm{e}^{-\frac{\varepsilon_\nu}{KT}}}=\frac{\varepsilon_\nu}{\mathrm{e}^{\frac{\varepsilon_\nu}{KT}}-1}=\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{KT}}-1}. \tag{5.1.8}$$

这样得到了黑体辐射本领的普朗克公式

$$r(\nu,T)=\frac{2\pi h}{c^2}\frac{\nu^3}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{KT}}-1}. \tag{5.1.9}$$

在与客观规律相比较时,积分

$$R(T)=\int_0^\infty r(\nu,T)\mathrm{d}\nu=\frac{2\pi K^4}{h^3c^2}T^4\int_0^\infty\frac{\left(\frac{h\nu}{KT}\right)^3\mathrm{d}\left(\frac{h\nu}{KT}\right)}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{KT}}-1}=\frac{2\pi^5K^4}{15h^3c^2}T^4.$$

从而只要把常数取为

$$h=\left(\frac{15c^2}{2\pi^5K^4}\sigma\right)^{\frac{1}{3}}=6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}.$$

称为普朗克常数,发现(5.1.9)式以惊人的精确性与实验规律相一致.

普朗克把光的这个基本能量 $\varepsilon_\nu=h\nu$ 称为量子.量子的观念与经典观念是如此相左,以致普朗克本人一时也难于置信,只是在花费了多年的时间,想方设法寻找途径来消除对量子的需要,为回到经典物理理论而斗争终未见效之后,不得不承认"无济于事,我们必须与量子理论共处".

2. 光电效应

光束照射在金属表面,使电子从金属中逸出,称为**光电效应**.其实验如图 5.2 所示.

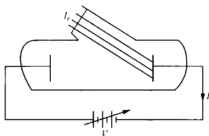


图 5.2

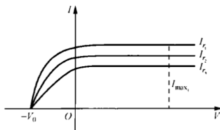


图 5.3

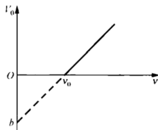


图 5.4

如图5.3和5.4所示,实验规律为

(1) 饱和电流 I_{max}:

光强 I_r 与光频 ν 固定时,光电流 I 随电压 V 增加而增加.当电压足够大时,光电流 I 趋向饱和值 I_{max}.饱和电流与光强成正比,即 $I_{max}\propto I_r$.

(2) 遏制电位 V_0:

光强 I_r 与光频固定时,光电流 I 随电压 V 减小而减小.当电压反向达 V_0 时,不再有光电流,$V_0(>0)$称作遏制电位.存在遏制电位表明,光电子逸出金属后尚有剩余的动能,它与光强关系为

$$T=\varepsilon-A.$$

其中 ε 是电子从光中获得的能量,A 是电子从金属中逸出时需付出的能量,称为金属的**逸出功**.光频 ν 一定时,不同光强 I_r 下的遏制电位 V_0 相同.

(3) 截止频率 ν_0(红限):

遏止电位 V_0 与光频呈线性关系

$$V=a\nu-b,\quad a,b\text{ 是常数}.$$

当 $V_0=0$ 时,$\nu=\dfrac{b}{a}\equiv\nu_0$,$\nu\leqslant\nu_0$ 时不论光强 I_r 多强,正向电压 V 多大,总有 $I=0$,即不会发生光电效应,故 ν_0 称为光的**红限**,而 $\lambda_0=\dfrac{c}{\nu_0}$称为光的**截止波长**.

(4) 弛豫时间 τ:

从光照射到金属至产生光电子的时间,实验结果为 $\tau<10^{-9}$ s.

光的波动理论认为，光照射在金属上使金属内的自由电子做强迫振动. 当强迫振动的振幅累积到足够大，使其能量足以克服金属表面的脱出功时，就会逸出表面成为光电子. 因此电子获得的能量正比于光强 I_r 和光照时间，而与光频无关. 这样经典的波动理论无法解释当 $\nu<\nu_0$ 时为什么不出现光电子；为什么当 $\nu>\nu_0$ 时，无论 I_r 多弱，出现光电子的时间总是 $\tau<10^{-9}$ s. 有人估算，对于 $I_r\sim 0.1\,\dfrac{\mu\mathrm{W}}{\mathrm{cm}^2}$ 的紫光（很弱），电子做强迫振动累积到能量 $\varepsilon=eV_0+A$ 约需 50 min，而实验结果却是 $\tau<10^{-9}$ s. 对于光电效应，经典理论再次失效了.

爱因斯坦第一个主动接受了普朗克的光量子观念，认为光与电子的能量交换是量子化的

$$\varepsilon = h\nu.$$

因此

$$eV_0 = h\nu - A.$$

而且认为，光强 I_r 与光量子的数目成正比. 这样光电效应的实验规律就顺理成章地得到了解释：

a. 饱和电流 $I_{\max}$ 正比于光电子数，正比于光量子数，正比于光强；

b. 遏制电位 $V_0=\dfrac{h}{e}\nu-\dfrac{A}{e}$，当 $V\leqslant -V_0$ 时 $I=0$；

c. 红限 $\nu_0=\dfrac{A}{h}=\dfrac{b}{a}$，当 $\nu<\nu_0$ 时 $h\nu<A$，不会产生光电子；

d. 弛豫时间：只要 $h\nu>A$，电子吸收一个光量子即逸出金属或为光电子，所需时间很短，τ 与光强无关.

3. 氢原子光谱

氢原子的光谱是由许多分立和尖细的谱线组成的，而且分成许多线系. 其波长的实验规律是

$$\frac{1}{\lambda} = R_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right),\quad m=1,2,3,\cdots;\quad n=m+1,m+2,m+3,\cdots. \tag{5.1.10}$$

其中 R_{H} 称为氢原子的里德伯常数. 不同的 m 给出不同的线系，如

$m=1$ 为莱曼系， $m=2$ 为巴尔末系， $m=3$ 为帕邢系，

$m=4$ 为布拉开系， $m=5$ 为普丰德系， ….

而不同的 n 则给出同一线系中各分立谱线的波长.

对于原子光谱的这种规律，经典物理无法作出解释. 在电子绕核作轨道运动的原子模型中，电子是作加速运动，因而会不断地产生辐射，辐射频率应该是连续分布的. 而其谐波的频率则是基波频率的整数倍，与谱线波长的实际规律也不符. 另

外,电子因不断产生辐射而将不断损失能量,最终将落到原子核之中去,这样将不可能有稳定的原子.所以原子谱线规律((5.1.10)式)被总结出来以后的二三十年间,无人能对此作出解释.

在普朗克量子观念的启示下,玻尔认为原子发光发出的既然是光量子 $h\nu$,那么原子一定是从一个较高的能态 E_n 跃迁到一个较低的能态 E_m,而

$$E_n - E_m = h\nu = \frac{hc}{\lambda}.$$

于是只要氢原子存在着稳定的状态,其相应的能量为

$$E_n = -\frac{hc}{n^2}R_{\mathrm{H}}. \tag{5.1.11}$$

那么氢原子光谱的规律((5.1.10)式)就自然地得到了解释.然而对于氢原子稳定状态的能量为什么与整数 n 的平方成反比呢?玻尔却没有能挣脱经典观念的束缚,仍然用了电子绕核旋转的轨道运动观念,然后给轨道强加了角动量必须量子化的条件才导出了(5.1.10)式.索末菲则是在玻尔思想体系的基础上把圆轨道推广成了椭圆轨道,从而扩大了玻尔理论的适用范围,并未能有观念上的突破.因为玻尔的理论体系终究是在经典观念的范畴内强加进量子化条件而形成的,不能成为彻底的量子理论,因而被后人称为老量子论.尽管如此,玻尔把普朗克的量子观念引入了原子结构当中,为量子论的建立和完善做了巨大贡献,因而于 1922 年也被授予诺贝尔物理学奖.

4. 康普顿散射

康普顿效应是 X 光入射到轻元素使散射光的波长微小增大的效应.

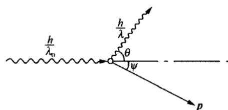


图 5.5

如果入射和散射的光是量子化的.入射和散射光的能量分别为 $h\nu_0$ 和 $h\nu$,动量分别为$\frac{h}{\lambda_0}$和$\frac{h}{\lambda}$;被撞粒子撞前静止,静质量为 ε_0,撞后动量为 $\boldsymbol{p}$(如图 5.5 所示).

由能量守恒

$$\frac{hc}{\lambda} + \sqrt{\varepsilon_0^2 + p^2c^2} = \frac{hc}{\lambda_0} + \varepsilon_0,$$

以及动量守恒

$$\begin{cases} p\cos\psi + \dfrac{h}{\lambda}\cos\theta = \dfrac{h}{\lambda_0}, \\ p\sin\psi = \dfrac{h}{\lambda}\sin\theta \end{cases}$$

可以得到

$$h^2\left(\frac{1}{\lambda_0^2}+\frac{1}{\lambda^2}-\frac{2}{\lambda\lambda_0}\right)+\frac{2\varepsilon_0}{c^2}h\left(\frac{1}{\lambda_0}-\frac{1}{\lambda}\right)=p^2$$

和

$$h^2\left(\frac{1}{\lambda_0^2}+\frac{1}{\lambda^2}-\frac{2\cos\theta}{\lambda\lambda_0}\right)=p^2.$$

联立解得散射光波长的增加量

$$\Delta\lambda=\lambda-\lambda_0=\frac{hc}{\varepsilon_0}(1-\cos\theta)$$

和被撞粒子的反冲角

$$\tan\psi=\frac{\cot\dfrac{\theta}{2}}{1+\dfrac{hc}{\lambda_0\varepsilon_0}}.$$

表明散射光波长的增加量 $\Delta\lambda$ 与入射光的波长 λ_0 无关，只与散射角 θ 有关. 当 $\theta=\pi$ 时 $\Delta\lambda$ 达极大值

$$(\Delta\lambda)_{\max}=\frac{2hc}{\varepsilon_0}.$$

散射光波长的增加量 $\Delta\lambda=\lambda-\lambda_0$ 与入射光的波长 λ_0 无关，只随散射角 θ 和被撞粒子的静质量 ε_0 变化，记量

$$\lambda_C=\frac{hc}{\varepsilon_0}=\frac{h}{m_0c}$$

为被撞粒子的康普顿波长. 当被撞粒子是电子时，

$$\lambda_C=\frac{h}{m_0c}=0.00243\ \text{Å}$$

称为电子的康普顿波长. 其他粒子的康普顿波长则要比电子的康普顿波长小约两千倍以上.

实际测量时总是观察散射光波长改变量的相对值$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0}$. 显然只有当入射光 $\lambda_0\leqslant 1$ Å 的 X 射线，以及被撞粒子是自由电子 $\varepsilon_0=0.51$ MeV 时，$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0}$的数值才较大，易于被观察. 对于 $\lambda_0\sim100$ Å 的可见光入射以及对于被撞的粒子不是电子，康普顿散射是难以被观察到的.

康普顿效应证实了，不仅光的能量是量子化的，其动量也是量子化的.

二、静质量非 0 粒子的波动性

随着普朗克和爱因斯坦关于光的量子观念取得的成功，又由于经典物理学在描述微观粒子运动规律时不断遇到困难，人们反过来思考非 0 静质量的微观粒子

是否既具有粒子性，也像光那样具有波动性呢？德布罗意思考着：19 世纪在光的研究方面只重视了光的波动性而忽视了光的粒子性，而对于电子、质子、中子、原子、分子等等非 0 静质量的微观粒子的研究上是否又只重视了其粒子性而忽视了他们也有波动性呢？于是德布罗意大胆地设想，所有的微观粒子都应该既具有粒子性，也都具有波动性，即所有的微观粒子都具有波粒二象性. 并假设，微观粒子波与粒子性之间的联系是：在粒子不受外场作用的情况下是

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega, \\ \boldsymbol{p} = \dfrac{h}{\lambda}\dfrac{\boldsymbol{k}}{k} = \hbar\boldsymbol{k}. \end{cases} \tag{5.1.12}$$

其中 ν 和 $\boldsymbol{k}$ 是波的频率和波矢，是描述微观粒子波性的物理量，而 E 和 $\boldsymbol{p}$ 是能量和动量，是描述微观粒子粒子性的物理量，(5.1.12)式称为德布罗意关系.

对于电子，用电势差 V 加速后其德布罗意波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} = \frac{12.25}{\sqrt{V}}\text{Å}.$$

为了验证德布罗意假设，1928 年，戴维孙和革末把电子束打在镍单晶上进行衍射，测量衍射电子束出现极大值的位置(由方位角表示)，发现与布拉格公式 $n\lambda = d\sin\theta$ 很好地符合，证实了电子确以波动方式运动. 同年，菊池正士则把电子束穿过单晶云母片，获得了点状的衍射图样——劳厄相，而汤姆孙和塔尔塔科夫斯基则把电子束穿过金箔(多晶)，获得了同心圆的衍射图样——德拜相.

此后，在其他一些实验中，也观察到了原子、分子、中子等微观粒子的衍射现象，同时对实验数据的细致分析也从量上证明了德布罗意关系的正确性.

§5.2　量子力学的基本原理

量子力学和经典物理基本原理的建立过程是不相同的. 经典物理学的基本原理大多是由实验规律中总结出来的，比较直观，较容易验证；而量子力学的基本原理大多是通过人们的分析思考，首先作为“假设”提出，然后根据这些“假设”推证出来的结果去与实践比较，通过去伪存真而建立起来的，因此比较抽象，难于直接由实验去验证.

一、量子力学的基本原理

关于量子力学的基本原理，人们的认识仍然有些差别. 笔者就自己的认识简单归纳出下列数条：

(1) 所有的微观粒子都具有波粒二象性：微观粒子运动时呈现出波动性，交换能量和动量时呈现出粒子性.

（2）微观粒子的运动状态由一个随时空分布的特殊四元数型函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述，称为波函数，或称态函数.

一级波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\begin{bmatrix}F(\boldsymbol{r},t) & 0\\ G(\boldsymbol{r},t) & 0\end{bmatrix}=Fu_1+Gv_1; \tag{5.2.1}$$

二级波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\begin{bmatrix}F_1(\boldsymbol{r},t) & 0 & 0 & 0\\ F_2(\boldsymbol{r},t) & 0 & 0 & 0\\ G_1(\boldsymbol{r},t) & 0 & 0 & 0\\ G_2(\boldsymbol{r},t) & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}=(F_1u_1+F_2v_1)u_2+(G_1u_1+G_2v_1)v_2; \tag{5.2.2}$$

三级波函数

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r},t)&=\begin{bmatrix}F_1(\boldsymbol{r},t) & \\ \vdots & \\ F_4(\boldsymbol{r},t) & \\ G_1(\boldsymbol{r},t) & 0\\ \vdots & \\ G_4(\boldsymbol{r},t) & \end{bmatrix}\\ &=[(F_1u_1+F_2v_1)u_2+(F_3u_1+F_4v_1)v_2]u_3\\ &\quad+[(G_1u_1+G_2v_1)u_2+(G_3u_1+G_4v_1)v_2]v_3;\end{aligned} \tag{5.2.3}$$

…

粒子波函数的物理意义是：其模方 $\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是粒子于 t 时刻、在空间 $\boldsymbol{r}$ 处出现的概率. 给波函数赋予概率的意义称为对波函数的统计诠释，因此微观粒子的这种波动性是一种概率波.

由于微观粒子的波是概率波，因此波函数必定是连续的、单值的和有界的，他们被称为波函数的三个标准条件. 同时，由于微观粒子的波是概率波，任何时刻，在全空间，粒子必定会出现. 因此波函数还要满足归一化条件

$$\iiint_{\infty}\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}V=1. \tag{5.2.4}$$

当一个时空分布的特殊四元数型函数 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 不满足归一化条件

$$\iiint_{\infty}\phi^\dagger\phi\mathrm{d}V=K\neq 1$$

时，可以令

$$\psi=\frac{\phi}{\sqrt{K}}$$

来归一化，使之成为归一化了的波函数.

(3) 不在外场作用下的自由的微观粒子,其概率波是平面波

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{5.2.5}$$

其中,ψ_0 是与 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 相应的各级四元数常数,$\boldsymbol{k}$ 是波矢量,ω 是角频率.

对于自由粒子,其动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 是确定的,它们与描述波动性的物理量 $\boldsymbol{k}$ 和 ω 之间的关系是

$$\mathrm{i}\,\frac{E}{c}+\boldsymbol{p}=\hbar\left(\mathrm{i}\,\frac{\omega}{c}+\boldsymbol{k}\right),\quad 即\ \begin{cases}E=\hbar\omega,\\ \boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}.\end{cases} \tag{5.2.6}$$

其中$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$是归一化了的普朗克常数;(5.2.6)式称为德布罗意假设,或德布罗意关系.

(4) 微观粒子的力学量 Q 由四元数型的运算符号 $\hat{Q}$ 表示,而力学量的可能取值 Q 就是算符 $\hat{Q}$ 的本征值.

三个重要的力学量:位置 $\boldsymbol{r}$、动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E,其相应的算符分别是

$$\begin{cases}\boldsymbol{r}\rightarrow\hat{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{r},\\ \boldsymbol{p}\rightarrow\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\,\hbar\,\nabla,\\ E\rightarrow\hat{E}=\mathrm{i}\,\hbar\,\dfrac{\partial}{\partial t}.\end{cases} \tag{5.2.7}$$

其他力学量的算符形式是把经典物理学中力学量之间的关系式当做算符之间的关系式而运算出来的.

力学量算符的一个重要特征是他们必定自伴.算符自伴的定义是:对于任意的两个函数 $\phi(\boldsymbol{r})$ 和 $\psi(\boldsymbol{r})$,存在着关系

$$\iiint_{\infty}(\hat{Q}\phi)^{\dagger}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\iiint_{\infty}\phi^{\dagger}(\hat{Q}\psi)\mathrm{d}\boldsymbol{r},\quad 其中\ \mathrm{d}\boldsymbol{r}\equiv\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=\mathrm{d}V. \tag{5.2.8}$$

如果其中的函数 ϕ 和 ψ 都是算符 $\hat{Q}$ 的属于同一个本征值 Q 的本征函数时,此式就成为

$$Q^{*}\iiint_{\infty}\phi^{\dagger}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}=Q\iiint_{\infty}\phi^{\dagger}\psi\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

因此

$$Q^{*}=Q.$$

所以自伴算符的本征值必定是实数,也因此力学量的算符必定自伴.

(5) 建立微观粒子的运动方程——称为波动方程的过程是先把经典力学中的能量动量关系式代之以算符关系式,然后作用在波函数上而形成一个方程

$$(\hat{E}^{2}-c^{2}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-m_0^2c^4)\psi(\boldsymbol{r},t)=-\hbar^{2}c^{2}\left(\frac{\partial^{2}}{c^{2}\partial t^{2}}-\nabla^{2}+\frac{m_0^2c^2}{\hbar^{2}}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)=0. \tag{5.2.9}$$

称为克莱因-戈尔登方程(若粒子的静质量 $m_0=\frac{E_0}{c^2}=0$,则称为达朗贝尔方程),不过因为这个方程对时间是二阶导数的,t 时刻的波函数既决定于初始时刻的波函数 $\psi|_{t=0}$,还决定于初始时刻波函数对时间的一阶导数 $\left.\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|_{t=0}$,因此 $\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ 就不能保证是正定的. 这与态函数的统计诠释有矛盾,这样就不能把克莱因-戈尔登方程当做是任何一类微观粒子的波动方程(这一看法与当今流行的把克莱因-戈尔登方程当做是自旋为 0 的介子,自旋为 1 的光子的波动方程的看法大相径庭). 因此还要找出一个条件比克莱因-戈尔登方程更高的方程才能作为微观粒子的波动方程.

可以把克莱因-戈尔登方程因式分解成

$$(\hat{E}+\hat{H})(\hat{E}-\hat{H})\psi(\boldsymbol{r},t)=0.$$

上式中的 $\hat{H}$ 称为哈密顿算符,满足

$$\begin{cases}\hat{E}\hat{H}=\hat{H}\hat{E},\\ \hat{H}^2=c^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+m_0^2c^4.\end{cases}\tag{5.2.10}$$

这样,假如 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 满足方程

$$(\hat{E}-\hat{H})\psi(\boldsymbol{r},t)=0.\tag{5.2.11}$$

那么它也就满足了克莱因-戈尔登方程. 这个函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 就满足了 $\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\geqslant 0$ 的要求,所以(5.2.11)式才是微观粒子的波动方程.

用波函数的伴随 $\psi^\dagger$ 左乘波动方程(5.2.11),再用波函数 ψ 右乘其伴随方程,把两式相加得到

$$[\psi^\dagger(\hat{E}\psi)-(\hat{E}\psi)^\dagger\psi]-[\psi^\dagger(\hat{H}\psi)-(\hat{H}\psi)^\dagger\psi]=0.$$

即

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger\psi)+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\psi^\dagger(\hat{H}\psi)-(\hat{H}\psi)^\dagger\psi]=0.\tag{5.2.12}$$

这是粒子概率流连续性方程. 用 $\boldsymbol{j}$ 表示概率流的密度,则它满足

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\psi^\dagger(\hat{H}\psi)-(\hat{H}\psi)^\dagger\psi].\tag{5.2.13}$$

上式表明,$\boldsymbol{j}$ 与哈密顿算符的形式有关,同时又表明,$\hat{H}$ 有不同形式的解,因而波动方程(5.2.11)也有不同的类别,正好可以用来描述不同种类的粒子.

克莱因-戈尔登方程中除了有波动方程(5.2.11)的解 ψ ——概率波外,还包含着另一类解 ϕ,满足

$$\begin{cases}(\hat{E}+\hat{H})\phi=\psi,\\ (\hat{E}-\hat{H})\phi\neq 0.\end{cases}\tag{5.2.14}$$

而 $\phi^{\dagger}\phi$ 不是粒子的概率，称 ϕ 为与概率波相对应的非概率波. 不过单凭(5.2.14)式还不能由概率波 ψ 把非概率波 ϕ 完全确定下来，因为对于任意一个满足方程

$$(\hat{E}+\hat{H})(\hat{E}-\hat{H})X=0$$

的波 X，把非概率波 ϕ 作如下代换

$$\phi \to \phi+(\hat{E}-\hat{H})X$$

并不会影响到概率波 ψ，这称为非概率波 ϕ 的规范变换.

二、宏观粒子和微观粒子的本质差别

根据上述的基本原理，已经能够演绎出量子力学的基本理论以及发展出各种处理实际问题的特殊方法，并能够推论出微观世界的各种现象和规律，且都已为实践所证实. 这些量子力学的内容已在各种量子力学的书籍中较为详细地讨论，本文不多重复. 在下文的章节中，我们将着重讨论各种不同的波动方程以及它们各自描述的微观粒子的不同性质. 而这里则简要地说明一下上述原理中所含的量子观念与经典观念对于"粒子"认识上的本质区别.

所谓"粒子"，就是有着静止质量(0 或非 0)、其性质由各种力学量——位置 $\boldsymbol{r}$、速度 $\boldsymbol{v}$、动量 $\boldsymbol{p}$、角动量 $\boldsymbol{J}$、能量 E 等等所描述的一个客体. 经典物理学的认识是，在任何时刻，这些力学量都有一个确定的取值. 由于各力学量之间存在着联系，因此只要用位置和速度$(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})$就能够表示出粒子的状态，知道了状态$(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})$随时间的变化规律，也就知道了各种力学量随时间的变化规律以及粒子的运动情况.

量子力学的认识是，在任何时刻，描述粒子性质的各种力学量的取值并不一定是确定的，而只是一种分布 $C(Q)$，分布函数的模方 $C^{\dagger}(Q)C(Q)$就是该力学量取 Q 值的概率，因此分布函数就是一种概率波，而粒子的状态也就用概率波来描述. 知道了概率波随时间变化的情况，也就知道了各种力学量随时间变化的情况以及粒子的运动规律. 所以用最简单的语言来说，所谓的微观粒子就是它的各个力学量的取值都有着各自的概率分布的一个客体. 当然其中也包含着有某些力学量取某个值时的概率为 1，取其他值时为 0 的特殊情况. 然而所有的力学量都有确定的取值的情况是不可能的.

力学量 $\hat{Q}$ 的概率波 $C(Q)$称为力学量 Q 表象中的概率波，前文所使用的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$实际上就是位置 $\boldsymbol{r}$ 表象中的概率波. 同一个粒子在不同的表象中概率波的函数形式是不同的，但不同表象中的概率波之间是有着联系的，因此研究不同表象之间波函数的联系又成了量子理论中的一个内容，叫做表象理论，我们对此也不多讨论，而仅仅讨论已知了某个表象中的概率波以后怎样来求出其他的力学量.

假设已知了位置表象中粒子的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$，那么波函数的统计诠释告诉我们，粒子处在某个位置 $\boldsymbol{r}_0$ 的概率是 $\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)$. 这一诠释可以解剖成下列过程：位置 $\hat{\boldsymbol{r}}$

的本征方程为

$$\hat{\boldsymbol{r}}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)=\boldsymbol{r}_0\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0). \tag{5.2.15}$$

函数 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$是位置算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 的、属于本征值 $\boldsymbol{r}_0$ 的本征函数.对于所有的本征值 $\boldsymbol{r}_0$，本征函数 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$构成了正交、完备的函数系，因此波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$可以用此函数系展开得

$$\psi(\boldsymbol{r})=\iiint\psi(\boldsymbol{r}_0)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_0. \tag{5.2.16}$$

展开式系数 $\psi(\boldsymbol{r}_0)$的模方 $\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)$就是粒子处在位置 $\boldsymbol{r}_0$ 处的概率.

仿照上述过程来求动量在位置表象中的概率分布.动量算符的本征方程是

$$\hat{\boldsymbol{p}}\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\right]=\boldsymbol{p}\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\right]. \tag{5.2.17}$$

函数

$$\psi_p(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{5.2.18}$$

就是动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 属于本征值 $\boldsymbol{p}$ 的本征函数.对于所有的本征值 $\boldsymbol{p}$，相应的所有本征函数也构成了正交完备的函数系，因此可以将状态函数 $\psi(\boldsymbol{r})$对此函数系展开得

$$\psi(\boldsymbol{r})=\iiint C(\boldsymbol{p})\psi_p(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{p},\quad \mathrm{d}\boldsymbol{p}\equiv\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z. \tag{5.2.19}$$

展开式的系数

$$C(\boldsymbol{p})=\iiint\psi_p^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}. \tag{5.2.20}$$

其模方 $C^\dagger(\boldsymbol{p})C(\boldsymbol{p})$就是粒子的动量为 $\boldsymbol{p}$ 时的概率.

对于任何一个力学量 $\hat{Q}$，它的本征方程为

$$\hat{Q}\psi_q(\boldsymbol{r})=Q\psi_q(\boldsymbol{r}). \tag{5.2.21}$$

函数 $\psi_q(\boldsymbol{r})$为算符 $\hat{Q}$ 的属于本征值 Q 的本征函数，所有本征值为 Q 的本征函数系总构成正交完备的函数系，因此可以将态函数 $\psi(\boldsymbol{r})$对它们展开

$$\psi(\boldsymbol{r})=\int C(Q)\psi_q(\boldsymbol{r})\mathrm{d}Q. \tag{5.2.22}$$

展开式的系数

$$C(Q)=\int\psi_q^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{5.2.23}$$

的模方 $C^\dagger(Q)C(Q)$就是在状态 $\psi(\boldsymbol{r})$中力学量 $\hat{Q}$ 取 Q 值的概率.

三、力学量的平均值

处在某个状态中的粒子，它的各个力学量取值虽不确定，但它的概率分布是知

道的,因此能求出该力学量的平均值

$$\langle Q\rangle \equiv \bar{Q} = \int C^{\dagger}(Q) Q C(Q) \mathrm{d}Q. \tag{5.2.24}$$

例如对于位置

$$\langle \boldsymbol{r}\rangle = \iiint \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{r} \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

对于动量

$$\langle \boldsymbol{p}\rangle = \iiint C^{\dagger}(\boldsymbol{p}) \boldsymbol{p} C(\boldsymbol{p}) \mathrm{d}\boldsymbol{p}.$$

为运算简单,我们讨论一维空间的情形.

$$\langle p_x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C^{\dagger}(p_x) p_x C(p_x) \mathrm{d}p_x. \tag{5.2.25}$$

而

$$\begin{cases} C(p_x) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \mathrm{d}x, \\ C^{\dagger}(p_x) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \psi^{\dagger}(x) \mathrm{d}x. \end{cases}$$

代入(5.2.25)式中得

$$\langle p_x\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x'} \psi^{\dagger}(x') p_x \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \psi(x) \mathrm{d}x \mathrm{d}p_x \mathrm{d}x'. \tag{5.2.26}$$

利用恒等式

$$p_x \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} = \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x},$$

将(5.2.26)式改写成

$$\begin{aligned} \langle p_x\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x'} \psi^{\dagger}(x') \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \psi(x) \mathrm{d}x\right] \mathrm{d}p_x \mathrm{d}x' \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x'} \psi^{\dagger}(x') \left[\mathrm{i}\hbar \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \psi(x) \Big|_{x=-\infty}^{x=\infty} \right. \\ &\quad \left. - \mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x x} \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right] \mathrm{d}p_x \mathrm{d}x' \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_x (x'-x)} \psi^{\dagger}(x') \hat{p}_x \psi(x) \mathrm{d}p_x \mathrm{d}x' \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{\dagger}(x) \hat{p}_x \psi(x) \mathrm{d}x. \end{aligned}$$

推广至三维空间即是

$$\langle \boldsymbol{p}\rangle = \iiint_{\infty} \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}) \hat{\boldsymbol{p}} \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

经过类似的运算,可以得到任何一个力学量 Q 在状态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 中的平均值为

$$\langle Q\rangle = \iiint_{\infty} \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r})\hat{Q}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

显然当 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是算符 $\hat{Q}$ 的属于本征值 Q_0 的本征函数时

$$\langle Q\rangle = Q_0.$$

四、不确定关系

在状态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 中,力学量的取值并非确定,但它的概率分布是已知的.为了知道该力学量取值的不确定程度,可以研究力学量的取值与其平均值的偏差.然而,由于

$$\overline{\hat{Q}-\overline{Q}} = \overline{Q} - \overline{Q} \equiv 0.$$

因此用 $Q-\overline{Q}$ 来衡量偏差的大小是没有意义的.衡量偏差大小的方法是用均方偏差

$$\overline{(\hat{Q}-\overline{Q})^2} = \overline{\hat{Q}^2 - 2\overline{Q}\hat{Q} + \overline{Q}^2} = \overline{\hat{Q}^2} - \overline{Q}^2.$$

在一个状态中,任意两个力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的均方偏差之间存在着制约关系,称为不确定关系(测不准关系).下面我们推导这个关系.

取实的参数 λ,计算下述积分

$$\begin{aligned}
I(\lambda) &= \int\{[(\hat{A}-\overline{A}) + \mathrm{i}\lambda(\hat{B}-\overline{B})]\psi\}^{\dagger}[(\hat{A}-\overline{A}) + \mathrm{i}\lambda(\hat{B}-\overline{B})]\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&= \int[(\hat{A}-\overline{A})\psi]^{\dagger}(\hat{A}-\overline{A})\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\lambda\int\{[(\hat{B}-\overline{B})\psi]^{\dagger}(\hat{A}-\overline{A})\psi \\
&\quad - [(\hat{A}-\overline{A})\psi]^{\dagger}(\hat{B}-\overline{B})\psi\}\mathrm{d}\boldsymbol{r} + \lambda^2\int[(\hat{B}-\overline{B})\psi]^{\dagger}(\hat{B}-\overline{B})\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} \geqslant 0.
\end{aligned}$$

由于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 都是自伴算符,故

$$\begin{aligned}
I(\lambda) &= \int\psi^{\dagger}(\hat{A}-\overline{A})^2\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} - \mathrm{i}\lambda\int\psi^{\dagger}[(\hat{B}-\overline{B})(\hat{A}-\overline{A}) - (\hat{A}-\overline{A})(\hat{B}-\overline{B})]\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&\quad + \lambda^2\int\psi^{\dagger}(\hat{B}-\overline{B})\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r} \\
&= \overline{(\hat{A}-\overline{A})^2} + \mathrm{i}\lambda\,\overline{(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})} + \lambda^2\,\overline{(\hat{B}-\overline{B})^2} \geqslant 0.
\end{aligned}$$

所以

$$\overline{(\hat{A}-\overline{A})^2}\cdot\overline{(\hat{B}-\overline{B})^2} \geqslant -\frac{1}{4}\,\overline{(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})}^2.$$

这就是两个力学量均方偏差之间必须满足的关系,称为**不确定关系**.

若

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}.$$

称为两个算符不对易,即两个力学量不能同时确定,那么不确定关系式的右端不为 0.

例如 $\hat{A}$ 表示某个方向的位置 $\hat{x}$，$\hat{B}$ 表示该方向上的动量 $\hat{p}_x=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. 于是

$$-x\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\cdot x=-x\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\hbar x\frac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\hbar=\mathrm{i}\hbar.$$

不确定关系是微观粒子力学量取值不确定，是概率分布导致的必然结果，是波粒二象性的形象体现.

假设力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 能同时取确定的值. 在经典物理学中，力学量 A 和 B 都能同时取确定的值，则左右两端均为 0，此式并无意义. 在量子力学中，总存在力学量 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不能同时取确定的值的情况，这样上式右端 $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\neq 0$，也即算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易时，两个力学量的均方偏差的乘积就不可能小于某个值，某个力学量的偏差变小时，另一个力学量的偏差就必然增大.

以 x 方向的位置 $\hat{x}$ 和动量 $\hat{p}_x$ 为例：

$$\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x x=-\mathrm{i}\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right)=\mathrm{i}\hbar.$$

故

$$\overline{(\hat{x}-\overline{x})^2}\cdot\overline{(\hat{p}_x-\overline{p}_x)^2}\geqslant\frac{\hbar}{4}.$$

其他两个方向的位置和动量，时间和能量间的不确定关系与此类似. 有人指出，正是不确定关系保证了电子不落入原子核中，才保持了原子和整个世界的稳定. 从这个意义上说，世界之所以是现在这个样子是靠不确定关系来支撑的.

§5.3 狄拉克方程

5.3.1 狄拉克方程

1927 年，狄拉克以其开创性的思维，建立了一个相对论性的波动方程，奠定了相对论性量子力学的基础.

一、狄拉克方程的通常形式

波动方程的普遍形式是

$$\hat{E}\psi=\hat{H}\psi. \tag{5.3.1.1a}$$

对于自由的粒子，狄拉克给出

$$\hat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta E_0. \tag{5.3.1.2}$$

其中

$$\hat{E} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla.$$

$E_0 = m_0c^2$ 是粒子的静质能. β 和 $\boldsymbol{\alpha}$ 是四个阵迹为 0、自伴的 4×4 常数矩阵

$$\alpha_x = \alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_y = \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$
$$\alpha_z = \alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{5.3.1.3}$$

波函数 ψ 有四个元,是 4×1 的列矩阵

$$\psi = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ g_1 \\ g_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}. \tag{5.3.1.4}$$

称为双旋量.

有时为了显现狄拉克方程的洛伦兹协变性,而用常数矩阵 $-\beta$ 左乘方程(5.3.1.1a)成为

$$(-\beta\hat{E} + c\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta\beta E_0)\psi = 0.$$

并写成

$$\left(\gamma_\mu\partial_\mu + \frac{E_0}{\hbar c}\right)\psi = 0. \tag{5.3.1.1b}$$

其中 $\partial_\mu = \dfrac{\partial}{\partial x_\mu}$, $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z, x_4 = \mathrm{i}ct$. 四个 γ 矩阵是

$$\gamma_i = -\mathrm{i}\beta\alpha_i \quad (i = 1,2,3), \quad \gamma_4 = \beta. \tag{5.3.1.5}$$

如果粒子受到势场 U 或电磁场 $(\varphi, \boldsymbol{a})$ 的作用,那么把方程中的

$$\begin{cases} \hat{E} \text{ 换成 } \hat{E} - U - q\varphi, \\ \hat{\boldsymbol{p}} \text{ 换成 } \hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{a} \end{cases} \tag{5.3.1.6}$$

即可,其中 q 是粒子的电荷. 以上所述就是现今的相对性量子力学所用的表述形式. 对于为什么狄拉克能够巧妙地把哈密顿算符取成(5.3.1.2)式所示的形式,一些量子力学的教科书作了较为详细的论述,读者可以参阅.

二、狄拉克方程的四元数形式

从四元数算法分析(参见§5.2)中的克莱因-戈尔登方程的因式分解式

$$\begin{cases}\hat{E}\hat{H} = \hat{H}\hat{E},\\ \hat{H}^2 = c^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + E_0^2.\end{cases} \tag{5.3.1.7}$$

只要把它看成是二级四元数领域中的等式，那么显然(5.3.1.7)式就有一解

$$\hat{H} = -\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_x\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_z\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2. \tag{5.3.1.8}$$

不难验证(5.3.1.8)式的平方满足(5.3.1.7)式.

应用四元数的矩阵表示(参见§1.4)知，(5.3.1.8)式所示的哈密顿算符就是(5.3.1.2)式. 这就表明，应用四元数的算法，狄拉克所给出的哈密顿算符是很容易得到的.

把波动方程理解成四元数形式的方程后，波函数也要写成四元数形式. 因为4×1的列矩阵与四元数之间没有明确的对应关系，因此需要先把列矩阵增广成方阵，然后就能与四元数对应了. 于是把波函数写成

$$\psi = \begin{bmatrix} f_1 & 0 & 0 & 0\\ f_2 & 0 & 0 & 0\\ g_1 & 0 & 0 & 0\\ g_2 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} = (f_1u_1 + f_2v_1)u_2 + (g_1u_1 + g_2v_1)v_2. \tag{5.3.1.9}$$

对四元数型的波函数作了上述的技术处理后，实际上是给态函数作了严格的约定：凡是粒子的状态，必须是只有第1列元数，其他各列元数均为0的方阵函数；反之，除第1列外，其他各列元素中只要有一个非0的方阵函数，都不能用来表示状态.

态函数(5.3.1.9)式的厄米共轭是

$$\psi^\dagger = \begin{bmatrix} f_1^* & f_2^* & g_1^* & g_2^*\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} = (f_1^*u_1^\dagger + f_2^*v_1^\dagger)u_2^\dagger + (g_1^*u_1^\dagger + g_2^*v_1^\dagger)v_2^\dagger. \tag{5.3.1.10}$$

因而波函数的模方形如

$$\psi^\dagger\psi = \begin{bmatrix} \sum_{\mu=1}^{2}(f_\mu^* f_\mu + g_\mu^* g_\mu) & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} = \left[\sum_{\mu=1}^{2}(f_\mu^* f_\mu + g_\mu^* g_\mu)\right]u_1u_2. \tag{5.3.1.11}$$

即它是仅有第1行第1列元素非0，其他元素均为0的方阵. 后面将会算及的物理量，如概率流密度、动能、能量等等也必定具有这样的形式，有时在书写中就把

(5.3.1.11)式右端的 u_1u_2 省略了.

态函数(5.3.1.9)的复共轭状态是

$$\psi^* = \begin{bmatrix} f_1^* & 0 & 0 & 0 \\ f_2^* & 0 & 0 & 0 \\ g_1^* & 0 & 0 & 0 \\ g_2^* & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = (f_1^* u_1 + f_2^* v_1)u_2 + (g_1^* u_1 + g_2^* v_1)v_2. \tag{5.3.1.12}$$

不要把四元数型函数

$$(f_1^* u_1^* + f_2^* v_1^*)u_2^* + (g_1^* u_1^* + g_2^* v_1^*)v_2^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & g_2^* \\ 0 & 0 & 0 & -g_1^* \\ 0 & 0 & 0 & -f_2^* \\ 0 & 0 & 0 & f_1^* \end{bmatrix}$$

误解成是状态 ψ 的复共轭状态,因为它本来就不满足四元数型态函数的约定.但是可把它右乘一个四元常数 v_1v_2 使之成为状态 ψ 的反共轭状态

$$\begin{aligned} \psi^c &= [(f_1^* u_1^* + f_2^* v_1^*)u_2^* + (g_1^* u_1^* + g_2^* v_1^*)v_2^*]v_1v_2 \\ &= (g_2^* u_1 - g_1^* v_1)u_2 - (f_2^* u_1 - f_1^* v_1)v_1 \\ &= \begin{bmatrix} g_2^* & 0 & 0 & 0 \\ -g_1^* & 0 & 0 & 0 \\ -f_2^* & 0 & 0 & 0 \\ f_1^* & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{5.3.1.13}$$

以上讨论表明,与用单列矩阵表示状态相比,用四元数形式来表示状态显得烦琐了许多.不过它的优点是容易由状态 ψ 给出反共轭状态 ψ^c,这个优点在讨论方程的正反变换时十分有用.对于一个单列矩阵并没有反矩阵的定义,然而对于一个四元数却有着反共轭的定义,从而增加了它的运算功能.

三、狄拉克方程的变换性质

讨论时空坐标系变换时狄拉克方程的变换性质.

当时空坐标系发生变换

$$R \to R', \quad 即 \quad \begin{cases} \boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}', \\ t \to t' \end{cases} \tag{5.3.1.14}$$

时,如果存在着模方非 0 的四元数 Λ 和 M,使得状态作相应的变换

$$\psi \to \psi' = \Lambda\psi. \tag{5.3.1.15}$$

而狄拉克方程

$$\hat{D}\psi = (\hat{E} - \hat{H})\psi = 0$$

中的算符作相应的变换

$$\hat{D} \longrightarrow \hat{D}' = M\hat{D}\Lambda^{-1}, \tag{5.3.1.16}$$

使得 $\hat{D}'$ 与 $\hat{D}$ 的形式相同，那么在新坐标系中方程

$$\hat{D}'\psi' = M\hat{D}\Lambda^{-1}\Lambda\psi = M(\hat{E} - \hat{H})\Lambda^{-1}\Lambda\psi = 0 \tag{5.3.1.17}$$

与原方程有相同的形式，表明方程满足了普遍的相对性原理.

不同的 Λ 和 M，体现了不同的时空坐标系变换.

(1) 坐标系的平移：

$$\begin{cases} \Lambda = 1, \\ M = 1. \end{cases} \tag{5.3.1.18}$$

(2) 绕空间 x 轴、y 轴、z 轴旋转 φ 角的变换分别为

$$\begin{cases} M(x) = \Lambda(x) = \cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{k}, \\ M(y) = \Lambda(y) = \cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{j}, \\ M(z) = \Lambda(z) = \cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{i}. \end{cases} \tag{5.3.1.19}$$

以坐标系绕 z 轴旋转 φ 角为例来验证：

$$\begin{aligned} \hat{D}' &= \left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right)\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - \mathrm{i}\hbar c\left(\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i} + \frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j} + \frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{k}\right)\boldsymbol{k}_2\right] \\ &\quad \left(\cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right) \\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 \\ &\quad - \mathrm{i}\hbar c\left\{\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i} + \left[\left(\cos^2\frac{\varphi}{2} - \sin^2\frac{\varphi}{2}\right)\boldsymbol{j} + 2\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{k}\right]\frac{\partial}{\partial y}\right. \\ &\quad \left. + \left[\left(\cos^2\frac{\varphi}{2} - \sin^2\frac{\varphi}{2}\right)\boldsymbol{k} - 2\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{j}\right]\frac{\partial}{\partial x}\right\}\boldsymbol{k}_2 \\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 \\ &\quad - \mathrm{i}\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i} + \left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y} - \sin\varphi\frac{\partial}{\partial x}\right)\boldsymbol{j} + \left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial x} + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial y}\right)\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{k}_2 \\ &= E + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_z'\boldsymbol{i} + \hat{p}_y'\boldsymbol{j} + \hat{p}_x'\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2. \end{aligned}$$

绕 x 轴或绕 y 轴的旋转可类似地验证.

(3) 沿空间 x 轴、y 轴、z 轴以速度 $u=c\beta$ 运动的惯性系变换分别为

$$\begin{cases} M(x) = \Lambda^{-1}(x) = a - b\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2, \\ M(y) = \Lambda^{-1}(y) = a - b\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2, \\ M(z) = \Lambda^{-1}(z) = a - b\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2. \end{cases} \tag{5.3.1.20}$$

其中，$a=\sqrt{\dfrac{\gamma+1}{2}}$，$b=\sqrt{\dfrac{\gamma-1}{2}}$，$\gamma=\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. 有 $a^2-b^2=1, a^2+b^2=\gamma, 2ab=\gamma\beta$. 选(5.3.1.20)式中的第一个式子进行验证，其他式子可类似验证.

$$\begin{aligned}\hat{D}' &= (a-b\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)\left[\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-\mathrm{i}\hbar c\left(\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i}+\frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j}+\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{k}\right)\boldsymbol{k}_2\right](a-b\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)\\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\gamma-\gamma\beta\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-\mathrm{i}\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2+\frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2+\frac{\partial}{\partial x}(\gamma\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2-\gamma\beta)\right]\\ &= \mathrm{i}\hbar\left(\gamma\frac{\partial}{\partial t}+\gamma\beta c\frac{\partial}{\partial x}\right)+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-\mathrm{i}\hbar c\left[\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{i}+\frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j}+\left(\gamma\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\gamma\beta}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{k}_2\\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-\mathrm{i}\hbar c\left(\frac{\partial}{\partial z'}\boldsymbol{i}+\frac{\partial}{\partial y'}\boldsymbol{j}+\frac{\partial}{\partial x'}\boldsymbol{k}\right)\boldsymbol{k}_2.\end{aligned}$$

(4) 宇称变换

$$M_p = \Lambda_p^{-1} = -\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2. \tag{5.3.1.21}$$

易证

$$\begin{aligned}\hat{D}' &= -\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2[\hat{E}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2+c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2](-\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2)\\ &= \hat{E}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.\end{aligned}$$

波函数的变换是

$$\psi(-\boldsymbol{r},t) = -\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2\psi(\boldsymbol{r},t) = (f_1u_1+f_2v_1)u_2-(g_1u_1+g_2v_1)v_2.$$

即

$$\begin{cases} f_1(-\boldsymbol{r},t) = f_1(\boldsymbol{r},t), \quad g_1(-\boldsymbol{r},t) = -g_1(\boldsymbol{r},t), \\ f_2(-\boldsymbol{r},t) = f_2(\boldsymbol{r},t), \quad g_2(-\boldsymbol{r},t) = -g_2(\boldsymbol{r},t). \end{cases} \tag{5.3.1.22}$$

(5) 时间反演

$$M_T = -\Lambda_T^{-1} = -\mathrm{i}\boldsymbol{j}_2. \tag{5.3.1.23}$$

易证

$$\begin{aligned}\hat{D}' &= -\mathrm{i}\boldsymbol{j}_2[\hat{E}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2+c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]\mathrm{i}\boldsymbol{j}_2\\ &= -\hat{E}+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2+c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.\end{aligned}$$

波函数的变换是

$$\psi(\boldsymbol{r},-t) = \mathrm{i}\boldsymbol{j}_2\psi(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}(g_1u_1+g_2v_1)u_2-\mathrm{i}(f_1u_1+f_2v_1)v_2$$

即

$$\begin{cases} f_1(\boldsymbol{r},-t) = \mathrm{i}g_1(\boldsymbol{r},t), \quad g_1(\boldsymbol{r},-t) = -\mathrm{i}f_1(\boldsymbol{r},t), \\ f_2(\boldsymbol{r},-t) = \mathrm{i}g_2(\boldsymbol{r},t), \quad g_2(\boldsymbol{r},-t) = -\mathrm{i}f_2(\boldsymbol{r},t). \end{cases} \tag{5.3.1.24}$$

(6) 时空反演

$$M_{pT} = \Lambda_{pT}^{-1} = -\boldsymbol{k}_2. \tag{5.3.1.25}$$

易证

$$\begin{aligned}\hat{D}' &= -\boldsymbol{k}_2[\hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 + c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})(-\boldsymbol{k}_2)] \\ &= -\hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.\end{aligned}$$

波函数的变换是

$$\psi(-\boldsymbol{r}, -t) = \boldsymbol{k}_2\psi(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}(g_1u_1 + g_2v_1)u_2 + \mathrm{i}(f_1u_1 + f_2v_1)v_2.$$

即

$$\begin{cases} f_1(-\boldsymbol{r}, -t) = \mathrm{i}g_1(\boldsymbol{r},t), & g_1(-\boldsymbol{r}, -t) = \mathrm{i}f_1(\boldsymbol{r},t), \\ f_2(-\boldsymbol{r}, -t) = \mathrm{i}g_2(\boldsymbol{r},t), & g_2(-\boldsymbol{r}, -t) = \mathrm{i}f_2(\boldsymbol{r},t). \end{cases} \tag{5.3.1.26}$$

(7) 正反变换：

狄拉克方程的反共轭方程是

$$\begin{aligned}&[\hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 + c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]^*[(f_1^*u_1^* + f_2^*v_1^*)u_2^* \\ &\quad + (g_1^*u_1^* + g_2^*v_1^*)v_2^*]v_1v_2 = 0.\end{aligned} \tag{5.3.1.27}$$

所以反粒子的波函数为

$$\psi'(\boldsymbol{r},t) = -\psi^c(\boldsymbol{r},t).$$

即

$$\begin{cases} f_1'(\boldsymbol{r},t) = -g_2^*(\boldsymbol{r},t), \\ f_2'(\boldsymbol{r},t) = g_1^*(\boldsymbol{r},t), \\ g_1'(\boldsymbol{r},t) = f_2^*(\boldsymbol{r},t), \\ g_2'(\boldsymbol{r},t) = -f_1^*(\boldsymbol{r},t). \end{cases} \tag{5.3.1.28}$$

由粒子的波动方程求反粒子的波动方程时，只要把方程中所有的 i 换成 $-\mathrm{i}$，并用四元常数 v_1v_2 右乘方程即可. 这种简便的方法是由于四元数有反共轭的定义，而在矩阵算法中是没有的. 这个法则与粒子是否带电没有关系.

四、方程所描述粒子的重要算符

1. 能量和动量算符

能量算符和动量算符是量子力学中两个最基本的算符，他们也是建立量子理论的基本假设之一：

$$\begin{cases} \hat{E} = \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}, \\ \hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla. \end{cases}$$

其正确性是通过他们所导出的结论是否与实践相符来检验的. 迄今为止还从未发现他们有什么不妥之处.

2. 哈密顿算符

自由粒子的哈密顿算符是

$$\hat{H} = -\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2$$

$$= \begin{bmatrix} E_0 & 0 & c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y) \\ 0 & E_0 & c(\hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z \\ c\hat{p}_z & c(\hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y) & -E_0 & 0 \\ c(\hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y) & -c\hat{p}_z & 0 & -E_0 \end{bmatrix} \tag{5.3.1.29}$$

当粒子受到外场的作用时,只要在 $\hat{E}$ 和 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 中增加相应的项(参见§5.2)即可.

3. 质量算符

粒子的相对论性质量为 m,由经典的爱因斯坦质能关系 $E=mc^2$,经量子化成算符关系,可求得粒子的质量算符

$$\hat{m} = \frac{\hat{H}}{c^2} = -\mathrm{i}m_0\boldsymbol{i}_2 - \frac{1}{c}(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2. \tag{5.3.1.30}$$

4. 速度算符

由(5.2.13)式可知概率流密度的散度

$$\nabla\cdot\boldsymbol{j} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\psi^\dagger\hat{H}\psi - (\hat{H}\psi)^\dagger\psi].$$

解得

$$\begin{cases} j_x = -c\psi^\dagger(\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)\psi, \\ j_y = -c\psi^\dagger(\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)\psi, \\ j_z = -c\psi^\dagger(\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2)\psi. \end{cases}$$

所以粒子的速度算符为

$$\begin{cases} \hat{v}_x = -c\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2 = c\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = c\alpha_x, \\ \hat{v}_y = -c\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2 = c\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = c\alpha_y, \\ \hat{v}_z = -c\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2 = c\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = c\alpha_z. \end{cases} \tag{5.3.1.31}$$

附带指出，现今量子理论中常用4×4的γ矩阵的四元数形式为

$$\begin{cases}\gamma_1 = -\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}_2,\\ \gamma_2 = -\boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2,\\ \gamma_3 = -\boldsymbol{i}\boldsymbol{j}_2,\\ \gamma_4 = -\mathrm{i}\boldsymbol{i}_2,\\ \gamma_5 = \mathrm{i}\boldsymbol{k}_2.\end{cases} \tag{5.3.1.32}$$

求得了粒子的相对论性质量算符$\hat{m}$和速度算符$\hat{\boldsymbol{v}}$后，从动量的经典定义式$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$通过量子化也可以求动量算符，果然有

$$\frac{1}{2}(\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}}+\hat{\boldsymbol{v}}\hat{m}) = \hat{\boldsymbol{p}}.$$

表明上述的算符理论是自洽的.

5. 角动量算符

1935年，诺特尔证明了一条定理：时空中的一种对称性，对应着某一个力学量守恒.例如，时间的均匀性对应着能量守恒；空间在某个方向均匀对应着该方向的动量分量守恒；空间对某个轴有旋转对称性，则对该旋转轴的角动量就守恒.

对于诺特尔定理我们不做严格的证明，仅就如何理解这一定理来简单地说明.假定时空对某个坐标q是均匀的，于是我们可以设想把整个粒子的系统沿着q增加的方向作一无穷小的移动δq.倘若移动前粒子的状态是$\psi(q)$，移动后的状态变成了$\psi(q)+\delta\psi(q)$.造成移动前后状态变动有两个原因：其一，移动后系统的位置q在移动前是$q-\delta q$；其二，相对于系统，坐标系沿q方向移动了$-\delta q$，而坐标系的变动会使状态发生变化$\psi'=\Lambda\psi$.由于时空在q方向是均匀的，因此沿q方向把整个粒子系统移动一下并不会对粒子的状态造成什么影响，所以

$$\begin{aligned}\psi(q)+\delta\psi(q) &= \Lambda(-\delta q)\psi(q-\delta q)\\ &= \left(1-\delta q\frac{\partial\Lambda}{\partial q}\bigg|_{q=0}\right)\left[\psi(q)-\delta q\frac{\partial\psi}{\partial q}\right]\\ &= \psi(q)-\delta q\left(\frac{\partial}{\partial q}+\frac{\partial\Lambda}{\partial q}\bigg|_{q=0}\right)\psi(q).\end{aligned}$$

上式中第二个等号后之所以只取到一级小量是因为δq是无穷小量.由此得到

$$\frac{\delta}{\delta q}\psi(q) = \left(-\frac{\partial}{\partial q}-\frac{\partial\Lambda}{\partial q}\bigg|_{q=0}\right)\psi(q).$$

由于状态$\psi(q)$是任意的，因此

$$\frac{\delta}{\delta q} = -\frac{\partial}{\partial q}-\frac{\partial\Lambda}{\partial q}\bigg|_{q=0}$$

是沿坐标q方向的无穷小移动算符，但因为它并不是自伴的，故还不是力学量的算符.为使它自伴，需乘上因子$\mathrm{i}\hbar$，并用符号记为

$$\hat{p}_q = \mathrm{i}\hbar\frac{\delta}{\delta q} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q} - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Lambda}{\partial q}\bigg|_{q=0} \tag{5.3.1.33}$$

称作与坐标 q 相对应的动量算符.

若空间沿 x 方向均匀,$q=x$,则 $\Lambda=1$,故

$$\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x};$$

若空间沿 y 方向均匀,$q=y$,则 $\Lambda=1$,故

$$\hat{p}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y};$$

若空间沿 z 方向均匀,$q=z$,则 $\Lambda=1$,故

$$\hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

若空间绕着 z 轴对称,$q=\varphi$,则由 $\Lambda=\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}$,得 z 方向的轨道角动量

$$\hat{J}_z = \hat{p}_\varphi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}. \tag{5.3.1.34}$$

其中的项

$$\hat{S}_z = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i} \tag{5.3.1.35}$$

在习惯上被称为自旋角动量算符.这一项产生的原因是当坐标系绕着空间 z 轴转动时,粒子的状态会发生变动,即 $\psi'=\Lambda\psi$ 中的 $\Lambda\neq1$.如果是非相对论的情形,由于薛定谔方程中的状态函数 ψ 只有标部(一个元),那么坐标系的转动不会引起状态的变化,即 $\Lambda=1$,因此角动量算符为

$$\hat{J}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \equiv \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x. \tag{5.3.1.36}$$

由于薛定谔方程是相对论性波动方程的非相对论极限,因此非相对论性的轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 也只是相对论性轨道角动量 $\boldsymbol{J}$ 的非相对论极限,而自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 是轨道角动量的相对论效应.但是在当今的量子力学中,人们把 $\boldsymbol{L}$ 当作了轨道角动量的全部,致使 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 不知是哪个空间的角动量,为此人们想象出了还存在着一个"自旋空间",认为 $\boldsymbol{S}$ 是这个自旋空间的角动量,并且认为 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 能够"耦合"而成一个角动量

$$\boldsymbol{S}+\boldsymbol{L}=\boldsymbol{J}. \tag{5.3.1.37}$$

称其为总角动量.至于这个总角动量 $\boldsymbol{J}$ 应该归属于哪个空间,当今的量子理论却从未作过交代.关于角动量 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{S},\boldsymbol{J}$ 的本质,在后文中再作较为详细的讨论.

类似的方法讨论对 x 轴、对 y 轴的旋转,得到 x 向、y 向的自旋算符

$$\begin{cases} \hat{S}_x = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{k} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Sigma_x, \\ \hat{S}_y = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Sigma_y, \\ \hat{S}_z = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Sigma_z. \end{cases} \tag{5.3.1.38}$$

于是自旋平方的算符为

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2. \tag{5.3.1.39}$$

所以由狄拉克方程所描述的粒子的自旋量子数是$\frac{1}{2}$.

角动量平方的算符则为

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \mathrm{i}\hbar(\hat{L}_z\boldsymbol{i} + \hat{L}_y\boldsymbol{j} + \hat{L}_x\boldsymbol{k}). \tag{5.3.1.40}$$

五、等价方程

在将二阶导数的克莱因-戈尔登方程进行因式分解，建立对时间是一阶导数的波动方程时，在同一个级别的四元数领域，分解出的结果并不是唯一的. 例如，对于(5.3.1.8)式也可以把哈密顿算符取成

$$\hat{H}' = -\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 + c(\hat{p}_x\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_z\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.$$

而建立波动方程

$$[\hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_x\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_z\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]\psi' = 0. \tag{5.3.1.41}$$

不过(5.3.1.41)式与(5.3.1.8)式是等价的，两者描述的是同一类粒子. 原因在于

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{k})[\hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 + c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{k}) \\ \quad = \hat{E} + \mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_x\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_z\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2, \\ \psi' = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{k})\psi. \end{cases} \tag{5.3.1.42}$$

一般来说,如果存在着有逆的四元常数 A,使得

$$\hat{H}' = A\hat{H}A^{-1}.$$

则称 $\hat{H}'$ 与 $\hat{H}$ 相似,并记为

$$\hat{H}' \backsimeq \hat{H}.$$

对于方程

$$(\hat{E} - \hat{H})\psi = 0.$$

作相似变换

$$A(\hat{E} - \hat{H})A^{-1}A\psi = 0$$

后即为

$$\begin{cases}(\hat{E} - \hat{H}')\psi' = 0,\\ \psi' = A\psi.\end{cases}$$

与原方程描述的是同一类粒子.

5.3.2 自由粒子的平面波解

一、平面波

自由粒子的定态狄拉克方程是

$$\hat{H}\psi = [-\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]\psi = E\psi. \tag{5.3.2.1}$$

容易看出,动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的三个分量算符 $\hat{p}_x, \hat{p}_y$ 和 $\hat{p}_z$ 都与哈密顿算符对易.因此动量 $\boldsymbol{p}$ 与能量 E 能够同时确定.动量的本征方程为

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi = -\mathrm{i}\hbar\nabla\psi = \boldsymbol{p}\psi. \tag{5.3.2.2}$$

(5.3.2.1)和(5.3.2.2)式表明,态函数中含有因子 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}$,于是态函数的四元数形式为

$$\psi = [(f_1u_1 + f_2v_1)u_2 + (g_1u_1 + g_2v_1)v_2]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}. \tag{5.3.2.3}$$

其中系数 f_1, f_2, g_1, g_2 均为 E, p_x, p_y, p_z 的函数.应用四元常数 u 和 v 的运算性质(参见(1.3.8a)式),将狄拉克方程(5.3.2.1)式展开得

$$\begin{cases}(E - E_0)f_1 - cp_zg_1 - c(p_x - \mathrm{i}p_y)g_2 = 0,\\ (E - E_0)f_2 + cp_zg_2 - c(p_x + \mathrm{i}p_y)g_1 = 0,\\ (E + E_0)g_1 - cp_zf_1 - c(p_x - \mathrm{i}p_y)f_2 = 0,\\ (E + E_0)g_2 + cp_zf_2 - c(p_x + \mathrm{i}p_y)f_1 = 0.\end{cases} \tag{5.3.2.4a}$$

方程(5.3.2.4a)有非0解的条件:系数矩阵的行列式为0导出了能量和动量的本征值之间存在着关系式

$$E^2 = E_0^2 + c^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = E_0^2 + c^2 p^2. \tag{5.3.2.5}$$

方程(5.3.2.4a)还表明,态函数中的第三第四个元与第一第二元之间存在关系

$$\begin{cases}(E+E_0)g_1 = cp_z f_1 + c(p_x - \mathrm{i}p_y)f_2,\\(E+E_0)g_2 = -cp_z f_2 + c(p_x + \mathrm{i}p_y)f_1.\end{cases} \tag{5.3.2.4b}$$

(5.3.2.4a)或(5.3.2.4b)式表明,当能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ 确定后,态函数的四个元中还剩下两个元独立可变,一个归一化条件还不足以把两者都确定下来,这就意味着还有一个力学量与能量和动量可以同时确定.

再来考察哈密顿算符,显然其中的算符 $\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}$ 既与 $\hat{H}$ 对易,又与 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 对易,而由(5.3.1.38)式知

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2p}(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}) = \hat{\boldsymbol{S}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}. \tag{5.3.2.6}$$

所以上式所示算符的物理意义是自旋在动量方向的投影,称为粒子的螺旋度,它的本征方程为

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}\psi = s\hbar\psi. \tag{5.3.2.7}$$

把态函数(5.3.2.3)代入上式得

$$\begin{aligned}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2p}\{&p_z[(\mathrm{i}f_1u_1 - \mathrm{i}f_2v_1)u_2 + (\mathrm{i}g_1u_1 - \mathrm{i}g_2v_1)v_2] + p_y[(f_2u_1 - f_1v_1)u_2\\&+ (g_2u_1 - g_1v_1)v_2] + p_x[(\mathrm{i}f_2u_1 + \mathrm{i}f_1v_1)u_2 + (\mathrm{i}g_2u_1 + \mathrm{i}g_1v_1)v_2]\}\\&= s\hbar[(f_1u_1 + f_2v_1)u_2 + (g_1u_1 + g_2v_1)v_2].\end{aligned}$$

求得

$$s^2 = \frac{1}{4}.$$

故螺旋度的量子数为

$$s = \pm\frac{1}{2}. \tag{5.3.2.8}$$

它即表明了粒子自旋的量子数为$\frac{1}{2}$,又表明螺旋度在固定的方向 $\boldsymbol{p}$ 的投影有$\frac{1}{2}$(右旋)和$-\frac{1}{2}$(左旋)两种独立无关的状态.

把(5.3.2.7)式代入波动方程(5.3.2.1)可得

$$\begin{cases}(E+E_0)g_1 = 2scpf_1,\\(E+E_0)g_2 = 2scpf_2.\end{cases} \tag{5.3.2.9}$$

将上式与(5.3.2.4b)式联立解得平面波的四个元

$$
\begin{cases}
f_1 = f, \\
f_2 = \dfrac{p_x + \mathrm{i}p_y}{2sp + p_z} f, \\
g_1 = \dfrac{2scp}{E + E_0} f, \\
g_2 = \dfrac{2scp}{E + E_0} \dfrac{p_x + \mathrm{i}p_y}{2sp + p_z} f.
\end{cases}
\tag{5.3.2.10}
$$

记动量 $\boldsymbol{p}$ 的方位角为 θ,φ，即

$$
\boldsymbol{p} = p(\sin\theta\cos\varphi\,\boldsymbol{e}_x + \sin\theta\sin\varphi\,\boldsymbol{e}_y + \cos\theta\,\boldsymbol{e}_z) \tag{5.3.2.11}
$$

有四种可能的平面波解

$$
\begin{cases}
\psi\left(E = E_+, s = \dfrac{1}{2}\right) = N\left(\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}u_1 + \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}v_1\right)\left(u_2 + \dfrac{cp}{E_+ + E_0}v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_+, s = -\dfrac{1}{2}\right) = N\left(-\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}u_1 + \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}v_1\right)\left(u_2 - \dfrac{cp}{E_+ + E_0}v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_-, s = \dfrac{1}{2}\right) = N\left(\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}u_1 + \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}v_1\right)\left(-\dfrac{cp}{E_+ + E_0}u_2 + v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} + E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_-, s = -\dfrac{1}{2}\right) = N\left(-\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}} + \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\varphi}{2}\mathrm{i}}v_1\right)\left(\dfrac{cp}{E_+ + E_0}u_2 + v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} + E_+ t)}.
\end{cases}
\tag{5.3.2.12a}
$$

其中

$$
E_+ = -E_- = \sqrt{c^2 p^2 + E_0^2}. \tag{5.3.2.13}
$$

以及归一化常数

$$
N = \sqrt{\frac{E_+ + E_0}{2E_+}}. \tag{5.3.2.14}
$$

通常为了方便，把动量 $\boldsymbol{p}$ 的方向取为 $\boldsymbol{e}_z$ 方向，即 $p_x = p_y = 0, p_z = p$，则(5.3.2.12a)式可以简化为

$$
\begin{cases}
\psi\left(E = E_+, s = \dfrac{1}{2}\right) = Nu_1\left(u_2 + \dfrac{cp}{E_+ + E_0}v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(pz - E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_+, s = -\dfrac{1}{2}\right) = Nv_1\left(u_2 - \dfrac{cp}{E_+ + E_0}v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(pz - E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_-, s = \dfrac{1}{2}\right) = Nu_1\left(-\dfrac{cp}{E_+ + E_0}u_2 + v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(pz + E_+ t)}, \\
\psi\left(E = E_-, s = -\dfrac{1}{2}\right) = Nv_1\left(\dfrac{cp}{E_+ + E_0}u_2 + v_2\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(pz + E_+ t)}.
\end{cases}
\tag{5.3.2.12b}
$$

二、一些力学量

在粒子的平面波状态(5.3.2.12b)式中,对其一些力学量计算如下:

1. 角动量

在 z 向平面波(5.3.2.12b)式中,由角动量算符(5.3.1.36)式可算得角动量的平均值

$$\begin{cases}\bar{J}_x = \iiint \psi^\dagger\left(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{k}\right)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0, \\ \bar{J}_y = \iiint \psi^\dagger\left(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{j}\right)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0, \\ \bar{J}_z = \iiint \psi^\dagger\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \\ \quad = \begin{cases}\dfrac{\hbar}{2}, & \text{当 } s = \dfrac{1}{2} \text{ 时;} \\ -\dfrac{\hbar}{2}, & \text{当 } s = -\dfrac{1}{2} \text{ 时.}\end{cases}\end{cases} \tag{5.3.2.15}$$

此式表明,狄拉克方程所描述的粒子,在自由情况下沿着动量方向存在着 $\pm\dfrac{\hbar}{2}$ 的角动量.这个结果在非相对论量子力学中是不存在的,为了反映这个客观事实,在现今的量子理论中把此作为一个基本假设放入自旋理论,并且认为狄拉克方程证明了这个假设的正确性.

2. 速度

在 z 向平面波(5.3.2.12b)式中,由速度算符(5.3.1.31)式可算得粒子速度的平均值

$$\begin{cases}\bar{v}_x = \iiint \psi^\dagger(-c\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0, \\ \bar{v}_y = \iiint \psi^\dagger(-c\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0, \\ \bar{v}_z = \iiint \psi^\dagger(-c\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2)\psi \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = \dfrac{c^2 p}{E} \\ \quad = \begin{cases}\dfrac{c^2 p}{E_+}, & \text{当 } E = E_+ \text{ 时;} \\ -\dfrac{c^2 p}{E_+}, & \text{当 } E = E_{-1} = -E_+ \text{ 时.}\end{cases}\end{cases} \tag{5.3.2.16}$$

上式表明,对于 $E=-\sqrt{c^2p^2+E_0^2}$ 的状态,粒子是沿着动量 $\boldsymbol{p}$ 的反方向行进的.

3. 磁矩

对于带电 $-e$ 的粒子(如电子),如果它绕着某空间轴(设为 $\boldsymbol{e}_z$ 轴)转动的速度

为 v_φ,那么将形成磁矩在该轴方向的分量

$$\mu_z = -e\iint \pi\rho^2 v_\varphi \, d\rho dz. \tag{5.3.2.17}$$

其中 ρ 是粒子到该轴的距离. 由于 $v_\varphi=0$,所以

$$\mu_z = 0. \tag{5.3.2.18}$$

此式表明,由狄拉克方程所描述的粒子在自由状态下即使带电也不存在磁矩. 这对现今量子力学自旋理论中的第二个假设:电子内禀着自旋磁矩是一个否定.

4. 能量

在自由粒子的平面波解(5.3.2.12a)或(5.3.2.12b)中,有两个能量小于 0 的波 $E=-E_+<0$. 在经典相对论力学中,质点的能量小于 0 是没有物理意义的,所以把 $E<0$ 的删去是非常自然的. 在相对论量子力学中,$E<0$ 的解是否也应该删去呢?

“$E<0$ 的波没有物理意义”,这句话可以省略对这种波的讨论,看似简单,但却是丧失了一次认识自然规律的机会!

首先,(5.3.2.12a)式中 $E=-E_+$ 的两个波确实是狄拉克方程的解. 在狄拉克理论的初创时期,怎样解释负能现象是一个困难. 由爱因斯坦质能关系 $E=mc^2$,$E<0$ 意味着 $m<0$. 这在物理学中是不可想象的,与客观规律矛盾的. 例如,所有的原子都存在着最低的能量状态,称为基态,因为只有这样才能有稳定的原子,才能存在着大千世界. 而负能量的状态却是无穷无尽的,原子向更低的能态跃迁将不断地进行,与有稳定的原子的客观规律相矛盾.

为了解释负能状态,狄拉克提出了所谓的“空穴理论”.“空穴理论”认为,在所有的负能态上已被无穷多个电子占满,因而由于泡利不相容原理,电子不再能向负能态上跃迁了,从而使得原子有了基态. 如果负能态上的电子缺失了一个,那么称为形成了一个“空穴”,这时原子已经处在了能量较高的激发态,从而将发生电子从正能态上向“空穴”的跃迁. 这个“空穴”理论看起来似乎奥妙,但笔者却认为它在理论上就是说不通的,因为负能态中电子的海洋远不是单电子理论所能导出的结论.

5. 反粒子

换一种思考方式来理解负能态的两个波. 上一节中曾对狄拉克方程作过正反变换,使方程变为

$$[\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 + c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2]\psi^c = -E\psi^c. \tag{5.3.2.19}$$

上式与(5.3.2.1)式的差别是:

$$\begin{cases} \hat{E} \text{ 的本征值从 } E \text{ 变成了 } -E, \\ \text{状态从 } \psi \text{ 变成了 } \psi^c. \end{cases}$$

这样,(5.3.2.1)式中的负能态波成了(5.3.2.19)式的正能态波.

$$\begin{cases}\psi^c\left(E=E_+,s=\dfrac{1}{2}\right)=N\left(\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}u_1-\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}v_1\right)\\ \qquad\cdot\left(u_2+\dfrac{cp}{E_++E_0}v_2\right)e^{\frac{i}{\hbar}(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_+t)},\\ \psi^c\left(E=E_+,s=-\dfrac{1}{2}\right)=N\left(\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}u_1+\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}v_1\right)\\ \qquad\cdot\left(u_2-\dfrac{cp}{E_++E_0}v_2\right)e^{\frac{i}{\hbar}(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_+t)}.\end{cases}\tag{5.3.2.20}$$

在状态 ψ^c 中的动量 $\boldsymbol{p}$ 的反方向，即

$$\begin{cases}\text{把 }\theta\text{ 换成 }\pi-\theta,\\ \text{把 }\varphi\text{ 换成 }\pi+\varphi.\end{cases}\tag{5.3.2.21a}$$

则

$$\begin{cases}\psi^c\left(E=E_+,s=\dfrac{1}{2}\right)=-iN\left(\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}u_1+\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}v_1\right)\\ \qquad\cdot\left(u_2+\dfrac{cp}{E_++E_0}v_2\right)e^{\frac{i}{\hbar}(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_+t)},\\ \psi^c\left(E=E_+,s=-\dfrac{1}{2}\right)=iN\left(-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}u_1+\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}v_1\right)\\ \qquad\cdot\left(u_2-\dfrac{cp}{E_++E_0}v_2\right)e^{\frac{i}{\hbar}(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_+t)}.\end{cases}\tag{5.3.2.21b}$$

与(5.3.2.1)式的正能态波((5.3.2.12a)的前两式)比较，仅差一个因子 $\pm i$，这对状态并无影响，不过波是沿着 $\boldsymbol{p}$ 的反向行进的，这种波就是反粒子的波.

狄拉克方程的正反变换不变性表明它同时描述了一对正反的粒子，其负能态的解实际上就是其反粒子的正能态解. 反粒子与粒子除了电荷等性质相反外，它是逆着动量方向前进的.

狄拉克方程的建立，一方面奠定了相对论量子理论的基础，另一方面预示了反粒子的存在是其又一功绩.

5.3.3 电子在均匀恒定磁场中的运动

一、方程的解

把磁场 $\boldsymbol{B}$ 的方向取为 $\boldsymbol{e}_z$ 方向，矢势为

$$\boldsymbol{a}=\frac{1}{2}\rho B\boldsymbol{e}_\varphi=\frac{1}{2}B(-y\boldsymbol{e}_x+x\boldsymbol{e}_y).\tag{5.3.3.1}$$

其中 (ρ,φ,z) 是圆柱坐标系. 电子在上式所示的均匀恒定磁场中的哈密顿算符是

$$\hat{H}=-\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-c\left[\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2}x\right)\boldsymbol{j}+\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2}y\right)\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{k}_2. \quad (5.3.3.2)$$

显然，z 向动量算符 $\hat{p}_z$ 与 $\hat{H}$ 对易，z 向角动量算符

$$\hat{J}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i} \quad (5.3.3.3)$$

与 $\hat{p}_z$ 的对易性是明显的，下面验证 $\hat{J}_z$ 与 $\hat{H}$ 的对易性.

$\hat{J}_z$ 与 $\hat{H}$ 中的前两项 $-\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-c\hat{p}_z\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2$ 对易很明显，只需验证与后两项的对易性.

$$\left(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\left[\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2}x\right)\boldsymbol{j}+\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2}y\right)\boldsymbol{k}\right]$$

$$=\left(x\hat{p}_y^2+\frac{eB}{2}x^2\hat{p}_y-y\hat{p}_x\hat{p}_y+\mathrm{i}\hbar\frac{eB}{2}y-\frac{eB}{2}xy\hat{p}_x\right)\boldsymbol{j}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2}x\right)\boldsymbol{k}$$

$$+\left(x\hat{p}_y\hat{p}_x+\mathrm{i}\hbar\frac{eB}{2}x-\frac{eB}{2}xy\hat{p}_y-y\hat{p}_x^2+\frac{eB}{2}y^2\hat{p}_x\right)\boldsymbol{k}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2}y\right)\boldsymbol{j},$$

$$\left[\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2}x\right)\boldsymbol{j}+\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2}y\right)\boldsymbol{k}\right]\left(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)$$

$$=\left(x\hat{p}_y^2+\frac{eB}{2}x^2\hat{p}_y+\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x-y\hat{p}_x\hat{p}_y-\frac{eB}{2}xy\hat{p}_x\right)\boldsymbol{j}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\hat{p}_y+\frac{eB}{2}x\right)\boldsymbol{k}$$

$$+\left(-\mathrm{i}\hbar\hat{p}_y+x\hat{p}_x\hat{p}_y-\frac{eB}{2}xy\hat{p}_y-y\hat{p}_x^2+\frac{eB}{2}y^2\hat{p}_x\right)\boldsymbol{k}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\hat{p}_x-\frac{eB}{2}y\right)\boldsymbol{j}.$$

两者相等，所以

$$\hat{J}_z\hat{H}=\hat{H}\hat{J}_z. \quad (5.3.3.4)$$

这就表明，在均匀恒定的磁场中，电子在磁场方向的动量分量、角动量分量，以及能量可以同时确定. 三个本征方程分别是

$$\hat{p}_z\psi=p_z\psi, \quad (5.3.3.5)$$

$$\hat{J}_z\psi=m\hbar\psi \quad (5.3.3.6a)$$

和

$$\hat{H}\psi=E\psi. \quad (5.3.3.7a)$$

由方程(5.3.3.5)可知，态函数 ψ 中有因子 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_z z}$，本征值 p_z 可以连续地取值. 方程(5.3.3.6a)在圆柱坐标系中的形式是

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\psi=m\hbar\psi. \quad (5.3.3.6b)$$

态函数为

$$\psi=[f_1(\rho,\varphi)u_1u_2+f_2(\rho,\varphi)v_1u_2+g_1(\rho,\varphi)u_1v_2+g_2(\rho,\varphi)v_1v_2]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_z z-Et)}. \quad (5.3.3.8a)$$

代入(5.3.3.6b)式得

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dfrac{\partial f_1}{\partial\varphi}=-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)f_1, & \mathrm{i}\dfrac{\partial g_1}{\partial\varphi}=-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)g_1,\\ \mathrm{i}\dfrac{\partial f_2}{\partial\varphi}=-\left(m+\dfrac{1}{2}\right)f_2, & \mathrm{i}\dfrac{\partial g_2}{\partial\varphi}=-\left(m+\dfrac{1}{2}\right)g_2.\end{cases}$$

所以,f_1 和 g_1 含有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}$,$f_2$ 和 g_2 含有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}$,且 $m=\pm\dfrac{1}{2},\pm\dfrac{3}{2},\pm\dfrac{5}{2},\cdots$,以保证态函数的单值性.

波动方程(5.3.3.7a)在圆柱坐标系中的形式为

$$\left\{E+\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2+c\left[\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\left(-\mathrm{i}\hbar\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\rho}-\mathrm{i}\hbar\cos\varphi\frac{\partial}{\rho\partial\varphi}+\frac{eB}{2}\rho\cos\varphi\right)\boldsymbol{j}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left(-\mathrm{i}\hbar\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\rho}+\mathrm{i}\hbar\sin\varphi\frac{\partial}{\rho\partial\varphi}-\frac{eB}{2}\rho\sin\varphi\right)\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{k}_2\right\}\psi=0. \tag{5.3.3.7b}$$

再把态函数(5.3.3.8a)进一步写成

$$\psi=\{[f_1(\rho)u_2+g_1(\rho)v_2]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}u_1$$
$$+\mathrm{i}[f_2(\rho)u_2+g_2(\rho)v_2]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}v_1\}\mathrm{e}^{-\lambda\rho^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_z z-Et)}. \tag{5.3.3.8b}$$

其中 $\lambda=\dfrac{eB}{4\hbar}$. 把此式代入(5.3.3.7b)式后展开,整理成为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\rho}-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{f_1}{\rho}-4\lambda\rho f_1+\dfrac{p_z}{\hbar}f_2+\varepsilon_2 g_2=0,\\ \dfrac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\rho}+\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{f_2}{\rho}+\dfrac{p_z}{\hbar}f_1-\varepsilon_2 g_1=0,\\ \dfrac{\mathrm{d}g_1}{\mathrm{d}\rho}-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{g_1}{\rho}-4\lambda\rho g_1+\dfrac{p_z}{\hbar}g_2+\varepsilon_1 f_2=0,\\ \dfrac{\mathrm{d}g_2}{\mathrm{d}\rho}+\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{g_2}{\rho}+\dfrac{p_z}{\hbar}g_1-\varepsilon_1 f_1=0.\end{cases} \tag{5.3.3.9}$$

其中,$\varepsilon_1=\dfrac{E-E_0}{\hbar c}$,$\varepsilon_2=\dfrac{E+E_0}{\hbar c}$. 把(5.3.3.9)式再对 ρ 求导一次,整理后为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2 f_1}{\mathrm{d}\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\rho}-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)^2\dfrac{f_1}{\rho^2}-4\lambda\rho\dfrac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\rho}+\left[\varepsilon_1\varepsilon_2-\dfrac{p_z^2}{\hbar^2}-4\lambda\left(m+\dfrac{3}{2}\right)\right]f_1=0,\\ \dfrac{\mathrm{d}^2 f_2}{\mathrm{d}\rho^2}+\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\rho}-\left(m+\dfrac{1}{2}\right)^2\dfrac{f_2}{\rho^2}-4\lambda\rho\dfrac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\rho}+\left[\varepsilon_1\varepsilon_2-\dfrac{p_z^2}{\hbar^2}-4\lambda\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\right]f_2=0.\end{cases} \tag{5.3.3.10}$$

g_1 和 g_2 的方程分别同 f_1 和 f_2 的方程,于是可用常数 k 分别表示成

$$\begin{cases} g_1(\rho) = k_1 f_1(\rho), \\ g_2(\rho) = k_2 f_2(\rho). \end{cases} \tag{5.3.3.11}$$

用幂级数法解(5.3.3.10)式.令

$$\begin{cases} f_1(\rho) = \rho^{s_1} \sum_{\nu=0}^{\infty} a_\nu \rho^{2\nu}, \\ f_2(\rho) = \rho^{s_2} \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu \rho^{2\nu}. \end{cases} \tag{5.3.3.12}$$

把他们代入(5.3.3.10)式,由其上式得

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \left[(2\nu + s_1)^2 - \left(m - \frac{1}{2}\right)^2 \right] a_\nu \rho^{2\nu+s_1-2}$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left[4\lambda \left(2\nu + s_1 + m + \frac{3}{2}\right) - \varepsilon_1 \varepsilon_2 + \frac{p_z^2}{\hbar^2} \right] a_\nu \rho^{2\nu+s_1}.$$

从 ρ^{s_1-2} 项解出

$$s_1 = \pm \left(m - \frac{1}{2}\right). \tag{5.3.3.13}$$

从其他各项得到系数的递推关系

$$a_{\nu+1} = \frac{4\lambda\left(2\nu + s_1 + m + \frac{3}{2}\right) - \varepsilon_1\varepsilon_2 + \frac{p_z^2}{\hbar^2}}{(2\nu + s_1 + 2)^2 - \left(m - \frac{1}{2}\right)^2} a_\nu, \quad \nu = 0,1,2,\cdots. \tag{5.3.3.14}$$

下面分两种情形讨论:

对于 $m = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \cdots$, $\rho \to 0$ 时态函数有界条件导致

$$s_1 = m - \frac{1}{2}.$$

$\rho \to \infty$ 时态函数的有界条件导致 $f_1(\rho)$ 的级数必须中断成多项式,于是

$$\varepsilon_1\varepsilon_2 - \frac{p_z^2}{\hbar^2} = 8\lambda n, \quad n = 1,2,3,\cdots. \tag{5.3.3.15}$$

由此得到电子能量的本征值为(负能态不再讨论)

$$E = \sqrt{E_0^2 + c^2 p_z^2 + 2neB\hbar c^2}, \quad n = 1,2,3,\cdots. \tag{5.3.3.16}$$

系数的递推关系(5.3.3.14)简化为

$$a_{\nu+1} = \frac{eB}{2\hbar} \frac{\nu + m + \frac{1}{2} - n}{(\nu+1)\left(\nu + m + \frac{1}{2}\right)} a_\nu, \quad \nu = 0,1,\cdots,n - m - \frac{1}{2}. \tag{5.3.3.17a}$$

对于$m=-\frac{1}{2},-\frac{3}{2},-\frac{5}{2},\cdots,\rho\to 0$处态函数的有界条件导致

$$s_1=-m+\frac{1}{2}.$$

$\rho\to\infty$处态函数应有界致使级数需中断成多项式，仍导致能量的本征值为(5.3.3.16)式，系数的递推关系则简化为

$$a_{\nu+1}=\frac{eB}{2\hbar}\frac{\nu+1-n}{(\nu+1)\left(\nu-m+\frac{3}{2}\right)},\quad \nu=0,1,\cdots,n-1. \qquad (5.3.3.17\text{b})$$

同样的方法解出$f_2(\rho)$，所得能量的本征值仍是(5.3.3.16)式. 再把$f_1(\rho)$和$f_2(\rho)$代入方程(5.3.3.9)解出$g_1(\rho)$和$g_2(\rho)$，结果如下：

对于$m=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots,n-\frac{1}{2}$的情形

$$\begin{cases} f_1(\rho)=\sum\limits_{\nu=0}^{n-m-\frac{1}{2}}a_\nu\rho^{2\nu+m-\frac{1}{2}}, \quad a_{\nu+1}=\dfrac{eB}{2\hbar}\dfrac{\nu+m+\frac{1}{2}-n}{(\nu+1)\left(\nu+m+\frac{1}{2}\right)}a_\nu, \\ f_2(\rho)=\sum\limits_{\nu=0}^{n-m-\frac{1}{2}}b_\nu\rho^{2\nu+m+\frac{1}{2}}, \quad b_{\nu+1}=\dfrac{eB}{2\hbar}\dfrac{\nu+m+\frac{1}{2}-n}{(\nu+1)\left(\nu+m+\frac{3}{2}\right)}b_\nu, \\ g_1(\rho)=k_1f_1(\rho)=\dfrac{1}{\varepsilon_2}\left[(2m+1)\dfrac{b_0}{a_0}+\dfrac{p_z}{\hbar}\right]f_1(\rho), \\ g_2(\rho)=k_2f_2(\rho)=\dfrac{1}{\varepsilon_2}\left[\dfrac{2eBn}{(2m+1)\hbar}\dfrac{a_0}{b_0}-\dfrac{p_z}{\hbar}\right]f_2(\rho); \end{cases}$$

(5.3.3.18a)

对于$m=-\frac{1}{2},-\frac{3}{2},-\frac{5}{2},\cdots$的情形

$$\begin{cases} f_1(\rho)=\sum\limits_{\nu=0}^{n-1}a_\nu\rho^{2\nu-m+\frac{1}{2}}, \quad a_{\nu+1}=\dfrac{eB}{2\hbar}\dfrac{\nu-n+1}{(\nu+1)\left(\nu-m+\frac{3}{2}\right)}a_\nu, \\ f_2(\rho)=\sum\limits_{\nu=0}^{n}b_\nu\rho^{2\nu-m-\frac{1}{2}}, \quad b_{\nu+1}=\dfrac{eB}{2\hbar}\dfrac{\nu-n}{(\nu+1)\left(\nu-m+\frac{1}{2}\right)}b_\nu, \\ g_1(\rho)=k_1f_1(\rho)=\dfrac{1}{\varepsilon_2}\left[\dfrac{2eBn}{(2m-1)\hbar}\dfrac{b_0}{a_0}+\dfrac{p_z}{\hbar}\right]f_1(\rho), \\ g_2(\rho)=k_2f_2(\rho)=\dfrac{1}{\varepsilon_2}\left[(2m-1)\dfrac{a_0}{b_0}-\dfrac{p_z}{\hbar}\right]f_2(\rho). \end{cases}$$

(5.3.3.18b)

此结果并未归一化.

二、电子的速度和磁矩

在解得了电子的概率波以后，我们计算电子的速度和形成的磁矩.

沿 $\boldsymbol{e}_z$ 方向的速度为

$$\bar{v}_z = -c\frac{\iiint \psi^\dagger \mathrm{i}\boldsymbol{k}_2 \psi\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}z}{\iiint \psi^\dagger \psi\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\varphi}$$

$$= c\frac{\iiint (f_1^* g_1 + f_1 g_1^* - f_2^* g_2 - f_2 g_2^*)\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}z}{\iiint (f_1^* f_1 + f_2^* f_2 + g_1^* g_1 + g_2^* g_2)\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}z}$$

$$= 2c\frac{\int_0^\infty [k_1 f_1^2(\rho) - k_2 f_2^2(\rho)]\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\rho\,\mathrm{d}\rho}{\int_0^\infty (1+k_1^2)f_1^2(\rho) + (1+k_2^2)f_2^2(\rho)\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\rho\,\mathrm{d}\rho}.$$

为了算出上式，需要导出几个积分公式. 计算积分

$$\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho = -\frac{1}{4\lambda}\left[\rho f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\Big|_{\rho=0}^{\rho=\infty} - \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}(\rho f_1 f_2)}{\mathrm{d}\rho}\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho\right]$$

$$= \frac{1}{4\lambda}\int_0^\infty \left(f_1 f_2 + \rho f_2\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\rho} + \rho f_1\frac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\rho}\right)\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho.$$

把(5.3.3.9)式的前两式代入上式得到

$$\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho = \frac{1}{4\lambda}\int_0^\infty \left[4\lambda\rho^2 f_1 f_2 + \left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)\rho f_1^2 - \left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right)\rho f_2^2\right]\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho.$$

于是有等式

$$\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)\int_0^\infty \rho f_1^2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho = \left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right)\int_0^\infty \rho f_2^2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\mathrm{d}\rho. \qquad (5.3.3.19)$$

将(5.3.3.19)式代入 $\bar{v}_z$ 的等式得

$$\bar{v}_z = 2c\frac{k_1\left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right) - k_2\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)}{(1+k_1^2)\left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right) + (1+k_2^2)\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)}$$

$$= \frac{2cp_z}{\hbar\varepsilon_2(1+k_1k_2) + p_z(k_1 - k_2)}$$

$$= \frac{c^2 p_z}{E} \qquad (5.3.3.20)$$

与经典力学的结果全同.

沿 $\boldsymbol{e}_\rho$ 方向的速度

$$\bar{v}_\rho = \bar{v}_x\cos\varphi + \bar{v}_y\sin\varphi = -c\psi^\dagger(\cos\varphi\boldsymbol{k} + \sin\varphi\boldsymbol{j})\boldsymbol{k}_2\psi$$
$$= c[(f_1^* g_2 + f_2 g_1^*)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} + (f_2^* g_1 + f_1 g_2^*)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}] = 0;$$

绕 $\boldsymbol{e}_z$ 轴的回转速度

$$\bar{v}_\varphi = -\bar{v}_x\sin\varphi + \bar{v}_y\cos\varphi = c\psi^\dagger(\sin\varphi\boldsymbol{k} - \cos\varphi\boldsymbol{j})\boldsymbol{k}_2\psi$$
$$= \mathrm{i}c[(g_2^* f_1 + f_2^* g_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} - (f_1^* g_2 + g_1^* f_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}]$$
$$= 2c[f_1(\rho)g_2(\rho) + f_2(\rho)g_1(\rho)]\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}$$
$$= 2c(k_1 + k_2)f_1(\rho)f_2(\rho)\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}.$$

因电子绕 $\boldsymbol{e}_z$ 轴的回转运动而形成 $\boldsymbol{e}_z$ 方向的磁矩

$$\mu_z = -e\frac{\iint \pi\rho^2\bar{v}_\varphi\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}z}{\iiint \psi^\dagger\psi\rho\,\mathrm{d}\rho\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}z}$$
$$= -ce\frac{(k_1 + k_2)\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho}{\int_0^\infty [(1 + k_1^2)f_1^2 + (1 + k_2^2)f_2^2]\mathrm{e}^{-2\lambda\rho}\rho\,\mathrm{d}\rho}.$$

由积分

$$\int_0^\infty \rho^4 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho = -\frac{1}{4\lambda}\left[\rho^3 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\Big|_{\rho=0}^{\rho=\infty} - \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}(\rho^3 f_1 f_2)}{\mathrm{d}\rho}\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho\right]$$
$$= \frac{1}{4\lambda}\int_0^\infty\left(3\rho^2 f_1 f_2 + \rho^3 f_1\frac{\mathrm{d}f_2}{\mathrm{d}\rho} + \rho^2 f_2\frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\rho}\right)\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho.$$

把(5.3.3.9)式的前两式代入上式的右端得到等式

$$\int_0^\infty\left[2\rho^2 f_1 f_2 + \left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)\rho^3 f_1^2 - \left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right)\rho_3 f_2^2\right]\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho = 0. \tag{5.3.3.21}$$

再把积分

$$\int_0^\infty \rho^3 f_1^2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho = \frac{1}{4\lambda}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}(\rho^2 f_1^2)}{\mathrm{d}\rho}\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho$$
$$= -\frac{2m+1}{4\lambda}\int_0^\infty \rho f_1^2\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho + \frac{\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}}{2\lambda}\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho; \tag{5.3.3.22}$$

$$\int_0^\infty \rho^3 f_2^2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho = \frac{1}{4\lambda}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}(\rho^2 f_2^2)}{\mathrm{d}\rho}\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho$$
$$= -\frac{2m-1}{4\lambda}\int_0^\infty \rho f_2^2\mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho + \frac{\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}}{2\lambda}\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 \mathrm{e}^{-2\lambda\rho^2}\,\mathrm{d}\rho \tag{5.3.3.23}$$

代入(5.3.3.21)式，并由(5.3.3.19)式得到等式

$$\int_0^\infty \rho^2 f_1 f_2 e^{-2\lambda\rho^2} d\rho = \frac{1}{4\lambda}\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)\int_0^\infty \rho f_1^2 e^{-2\lambda\rho^2} d\rho. \quad (5.3.3.24)$$

把(5.3.3.19)和(5.3.3.24)代入 μ_z 的算式得

$$\begin{aligned}\mu_z &= -\frac{ce}{4\lambda}\frac{(k_1+k_2)\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)\left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right)}{(1+k_1^2)\left(\varepsilon_2 k_2 + \frac{p_z}{\hbar}\right)+(1+k_2^2)\left(\varepsilon_2 k_1 - \frac{p_z}{\hbar}\right)} \\ &= -\frac{ce}{4\lambda}\frac{\varepsilon_2\left[\varepsilon_2 k_1 k_2 + (k_1-k_2)\frac{p_z}{\hbar}\right]-\frac{p_z^2}{\hbar^2}}{\varepsilon_2 k_1 k_2 + (k_1-k_2)\frac{p_z}{\hbar}+\varepsilon_2}.\end{aligned}$$

由(5.3.3.18a)和(5.3.3.18b)式中的 k_1 和 k_2 知

$$\varepsilon_2 k_1 k_2 + (k_1-k_2)\frac{p_z}{\hbar} = \frac{1}{\varepsilon_2}\left(\frac{2eBn}{\hbar}+\frac{p_z^2}{\hbar^2}\right).$$

再由电子的能级(5.3.3.16)式算得电子的回转运动产生的磁矩为

$$\mu_z = -n\frac{e\hbar c^2}{E}. \quad (5.3.3.25)$$

至此求解过程尚未最终完成，因为在解(5.3.3.18a)和(5.3.3.18b)式的状态中还存在着两个独立可变的常数 a_0 和 b_0，一个归一化条件还不足以把两者都确定下来.表明由 p_z，J_z 和 E 共同确定的这个状态((5.3.3.18a)和(5.3.3.18b)式)仍然是由两个独立的状态叠加而成的，应该还有力学量能与 p_z，J_z 和 E 同时确定.为了找出这个力学量，把这个状态分解成

$$\psi = a_0\psi_+ + b_0\psi_-. \quad (5.3.3.26)$$

显然

$$\begin{cases}\psi_+ = \dfrac{1}{a_0}\psi\Big|_{b_0=0}, \\ \psi_- = \dfrac{1}{b_0}\psi\Big|_{a_0=0}.\end{cases} \quad (5.3.3.27)$$

且利用(5.3.3.19)式易证

$$\iiint \psi_-^\dagger \psi_+ \rho\, d\rho\, d\varphi\, dz = \iiint \psi_+^\dagger \psi_- \rho\, d\rho\, d\varphi\, dz = 0,$$

表明状态 ψ_+ 和 ψ_- 是独立无关的.令

$$\begin{cases}\psi_+ = (\hat{H}+E)\phi_+, \\ \psi_- = (\hat{H}+E)\phi_-, \\ \phi = a_0\phi_+ + b_0\phi_-.\end{cases} \quad (5.3.3.28)$$

有

$$\psi = (\hat{H} + E)\phi.$$

用验算可证明

$$\begin{cases} \phi_+ = \dfrac{f_1(\rho)}{a_0(E+E_0)} \mathrm{e}^{-\lambda\rho^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_z z - Et)} u_1 u_2, \\ \phi_- = \mathrm{i}\dfrac{f_2(\rho)}{b_0(E+E_0)} \mathrm{e}^{-\lambda\rho^2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_z z - Et)} v_1 u_2. \end{cases} \tag{5.3.3.29}$$

对于状态 ϕ,有

$$\hat{S}_z \phi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \phi_\pm. \tag{5.3.3.30}$$

表明了 $\phi_\pm$ 是自旋 z 向分量的两个本征态,而状态 $\psi_\pm$ 是由自旋 z 向分量的两个本征态 $\phi_\pm$ 通过(5.3.3.28)式所决定的状态,但这两个状态本身却不是 $\hat{S}_z$ 的本征态.为了表示这个尚未知其名的力学量的算符,我们在形式上表示成

$$\phi_\pm = (\hat{H} + E)^{-1} \psi_\pm.$$

于是

$$\hat{S}_z (\hat{H} + E)^{-1} \psi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} (\hat{H} + E)^{-1} \psi_\pm.$$

所以

$$(\hat{H} + E) \hat{S}_z (\hat{H} + E)^{-1} \psi_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} \psi_\pm. \tag{5.3.3.31}$$

表明两个状态 ψ_+ 和 ψ_- 分别是算符 $(\hat{H}+E)\hat{S}_z(\hat{H}+E)^{-1}$ 的属于本征值 $\frac{\hbar}{2}$ 和 $-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态.

然而这个算符的物理意义是什么?它作用在函数上将怎样进行运算我们也不知晓,但它的本征值却是 $\pm\frac{\hbar}{2}$.

三、与泡利方程结果的对照

在非相对论量子力学的力学,泡利考虑到电子因内禀着自旋磁矩而在磁场中具有势能,而在薛定谔方程中加入了这项势能建立了泡利方程

$$\left[\frac{c^2}{2E_0}(\hat{\boldsymbol{p}} + e\boldsymbol{a})^2 + \frac{e\hbar c^2}{2E_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}\right] \phi = (E - E_0)\phi. \tag{5.3.3.32}$$

其中

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

在均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z\left(\boldsymbol{a}=\frac{1}{2}\rho B\boldsymbol{e}_\varphi\right)$中，力学量

$$\begin{cases}\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi},\\ \hat{p}_z = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial z},\\ \hat{S}_z = \dfrac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}.\end{cases} \tag{5.3.3.33}$$

都可与能量同时确定.解得能量的本征值为

$$E-E_0 = \frac{c^2 p_z^2}{2E_0} + n\frac{eB\hbar c^2}{E_0}. \tag{5.3.3.34}$$

属于本征值 $l_z=m-\frac{1}{2}, s_z=\frac{1}{2}$ 和本征值 $l_z=m+\frac{1}{2}, s_z=-\frac{1}{2}$ 的状态分别就是(5.3.3.28)式中的 ϕ_+ 和 ϕ_-.

相应于泡利方程(5.3.3.32)，电子的概率流密度为

$$\boldsymbol{v}' = \frac{\mathrm{i}\hbar c^2}{2E_0}(\phi_+\nabla\phi_+^* - \phi_+^*\nabla\phi_+ + \phi_-\nabla\phi_-^* - \phi_-^*\nabla\phi_-) + \frac{eBc^2}{2E_0}\rho(\phi_+^*\phi_+ + \phi_-^*\phi_-)\boldsymbol{e}_\varphi. \tag{5.3.3.35}$$

于是算出电子沿磁场方向运动的速度为

$$v_z' = \frac{c^2 p_z}{E_0}. \tag{5.3.3.36}$$

电子因绕磁场方向 $\boldsymbol{e}_z$ 回转而产生磁矩

$$\mu_z' = -e\iint \pi\rho^2 v_\varphi' \mathrm{d}\rho\mathrm{d}z.$$

对于状态 ϕ_+，有

$$v_\varphi' = \frac{\hbar c^2}{a_0^2(E+E_0)^2 E_0}\left[\left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{f_1^2(\rho)}{\rho} + 2\lambda\rho f_1^2(\rho)\right]\mathrm{e}^{-\lambda\rho^2};$$

对于状态 ϕ_-，有

$$v_\varphi' = \frac{\hbar c^2}{b_0^2(E+E_0)^2 E_0}\left[\left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{f_2^2(\rho)}{\rho} + 2\lambda\rho f_2^2(\rho)\right]\mathrm{e}^{-\lambda\rho^2}.$$

应用(5.3.3.22)式分别算出电子绕 $\boldsymbol{e}_z$ 回转而产生的磁矩

$$\mu_z' = \begin{cases}-\left(n-\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{e\hbar c^2}{E_0}, & \text{当 } l_z = m-\dfrac{1}{2}, s_z=\dfrac{1}{2}\text{ 时},\\ -\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{e\hbar c^2}{E_0}, & \text{当 } l_z = m+\dfrac{1}{2}, s_z=-\dfrac{1}{2}\text{ 时}.\end{cases} \tag{5.3.3.37}$$

泡利方程与狄拉克方程两种结果的对照见表 5.1.

表 5.1

	泡利方程	狄拉克方程
动量	p_z	p_z
能量	$E=E_0+\frac{c^2p_z^2}{2E_0}+n\frac{eB\hbar c^2}{E_0}$	$E=\sqrt{E_0^2+c^2p_z^2+2neB\hbar c^2}$ $=E_0+\frac{c^2p_z^2}{2E_0}+n\frac{eB\hbar c^2}{E_0}+\cdots$
角动量	$\begin{cases}L_z=\left(m-\frac{1}{2}\right)\hbar, & S_z=\frac{1}{2}\hbar\\ L_z=\left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar, & S_z=-\frac{1}{2}\hbar\end{cases}$ $L_z+S_z=m\hbar$	$J_z=m\hbar$
磁矩	$(\mu_l)_z=-\left(n-\frac{1}{2}\right)\frac{e\hbar c^2}{E_0}$, $(\mu_s)_z=-\frac{1}{2}\frac{e\hbar c^2}{E_0}$, $(\mu_l)_z=-\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{e\hbar c^2}{E_0}$, $(\mu_s)_z=\frac{1}{2}\frac{e\hbar c^2}{E_0}$, $(\mu_l)_z+(\mu_s)_z=-n\frac{e\hbar c^2}{E_0}$.	$\mu_z=-n\frac{e\hbar c^2}{E}$
波函数	$\phi=\begin{bmatrix}\phi_+\\ \phi_-\end{bmatrix}$	$\psi=\begin{bmatrix}F_1\\ F_2\\ G_1\\ G_2\end{bmatrix}=(\hat{H}+E)\begin{bmatrix}\phi_+\\ \phi_-\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$

从波函数看:狄拉克方程有四个元,泡利方程仅两个元,而且是狄拉克方程的四元波函数中略去后两个元的结果.

从力学量来看:泡利方程的结果是狄拉克方程结果的非相对论近似.然而,从泡利方程解得力学量时,已经附加了几条假设:电子"内禀"着$\frac{\hbar}{2}$的自旋角动量;"内禀"着$\frac{1}{2}\frac{e\hbar c^2}{E_0}$的磁矩;自旋角动量和磁矩会与轨道角动量和磁矩耦合成"总"的角动量和磁矩.这就意味着在非相对论量子力学中,必然要附加进自旋理论和角动量的耦合方法.而泡利方程本身也是根据这些物理思想才建立起来的.

两相对照,泡利方程是狄拉克方程的非相对论近似是显然的,近似之处在于,一方面波函数用$\phi_+u_1+\phi_-v_1$代替了$(F_1u_1+F_2v_1)u_2+(G_1u_1+G_2v_1)v_2$;另一方面在计算力学量时用静质能$E_0$代替了总能量$E$.更重要的一个差别是,在用非相对论近似时,还需要添加一个物理观念:电子内禀着自旋角动量,内禀着自旋磁矩,内

禀的角动量和磁矩与轨道角动量和磁矩耦合成了总的角动量和磁矩.泡利在建立他的方程时正是应用了这种物理观念的,而狄拉克方程却根本不必涉及电子内部是否存在着运动.

5.3.4 氢原子

一、氢原子的波函数

狄拉克方程对氢原子的成功处理是使氢原子迅速地得到公认的一个原因.

在氢原子中,单个电子在原子核所产生的库仑场中运动,具有势能

$$U(r)=-\frac{\hbar c\alpha}{r}.$$

其中 $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}=\frac{1}{137}$称为精细结构常数.定态的狄拉克方程

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{5.3.4.1}$$

中,哈密顿算符是

$$\hat{H}=-\frac{\hbar c\alpha}{r}-\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2-c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2. \tag{5.3.4.2}$$

有两个算符他们本身对易,又都与哈密顿算符对易.一个是 z 向角动量算符

$$\hat{J}_z=\hat{L}_z+\hat{S}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}; \tag{5.3.4.3}$$

另一个是算符

$$\hat{K}=\mathrm{i}+\frac{1}{\hbar}(\hat{L}_z\boldsymbol{i}+\hat{L}_y\boldsymbol{j}+\hat{L}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_2. \tag{5.3.4.4}$$

$\hat{J}_z$,$\hat{K}$,$\hat{H}$三个算符之间的对易性可由验算予以证明,但因运算冗长,我们把它略去.不过从解出的结果知道,这三个算符所相应的力学量确实能够同时确定,所以也反过来证实了它们确是对易的.

由角动量 z 向分量的本征方程

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\psi=m\hbar\psi \tag{5.3.4.5}$$

知,波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\{[F_1(\boldsymbol{r})u_1+F_2(\boldsymbol{r})v_1]u_2+[G_1(\boldsymbol{r})u_1+G_2(\boldsymbol{r})v_1]\}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \tag{5.3.4.6}$$

中,$F_1(\boldsymbol{r})$和 $G_1(\boldsymbol{r})$有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-\frac{1}{2})\varphi}$,$F_2(\boldsymbol{r})$和 $G_2(\boldsymbol{r})$有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+\frac{1}{2})\varphi}$.把算符 $\hat{K}$ 的本征方程

$$\hat{K}\psi = \left(\mathrm{i} + \frac{\hat{L}_z}{\hbar}\boldsymbol{i} + \frac{\hat{L}_y}{\hbar}\boldsymbol{j} + \frac{\hat{L}_x}{\hbar}\boldsymbol{k}\right)\boldsymbol{i}_2\psi = K\psi$$

在球坐标系(r,θ,φ)中展开得到

$$\begin{cases}\left(K+\frac{1}{2}+m\right)F_1(r,\theta) = -\sin\theta\frac{\partial F_2(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}F_2(r,\theta), & (5.3.4.7\text{a})\\ \left(K+\frac{1}{2}-m\right)F_2(r,\theta) = -\sin\theta\frac{\partial F_1(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}F_1(r,\theta), & (5.3.4.7\text{b})\\ \left(-K+\frac{1}{2}+m\right)G_1(r,\theta) = -\sin\theta\frac{\partial G_2(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}G_2(r,\theta), & (5.3.4.7\text{c})\\ \left(-K+\frac{1}{2}-m\right)G_2(r,\theta) = -\sin\theta\frac{\partial G_1(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}G_1(r,\theta). & (5.3.4.7\text{d})\end{cases}$$

把(5.3.4.7a)式对 $\cos\theta$ 再微商一次为

$$\left(K+\frac{1}{2}+m\right)\frac{\partial F_1(r,\theta)}{\partial\cos\theta} = -\sin\theta\frac{\partial^2 F_2(r,\theta)}{(\partial\cos\theta)^2} + \left(m+\frac{3}{2}\right)\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial F_2(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left(m+\frac{1}{2}\right)\frac{F_2(r,\theta)}{\sin^3\theta}.$$

将上式和(5.3.4.7a)式代入(5.3.4.7b)式得到了连带勒让德方程

$$\sin^2\theta\frac{\partial^2 F_2(r,\theta)}{(\partial\cos\theta)^2} - 2\cos\theta\frac{\partial F_2(r,\theta)}{\partial\cos\theta} + \left[K(K+1) - \frac{\left(m+\frac{1}{2}\right)^2}{\sin^2\theta}\right]F_2(r,\theta) = 0.$$

于是

$$F_2(r,\theta) = f(r)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{\left|K+\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta), \qquad (5.3.4.8\text{a})$$

其中 $K=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots;m=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2},\cdots,\pm|K|-\frac{1}{2}$.

应用连带勒让德多项式的运算公式

$$\begin{cases}(2l+1)\cos\theta\,\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_l = \left(l+m+\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l-1} + \left(l-m+\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l+1},\\ (2l+1)\sin^2\theta\frac{\mathrm{d}\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_l}{\mathrm{d}\cos\theta} = (l+1)\left(l+m+\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l-1} - l\left(l-m+\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l+1},\\ (2l+1)\sin\theta\,\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_l = \mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l+1} - \mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{l-1}.\end{cases}$$

把(5.3.4.8a)式代入(5.3.4.7a)式得到

$$F_1(r,\theta) = \left(K+\frac{1}{2}-m\right)f(r)\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{\left|K+\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta). \qquad (5.3.4.8\text{b})$$

从(5.3.4.7)式又可知道,只要把 K 换成 $-K$,下两式就与上两式相同.因此

$$G_1(r,\theta) = \left(-K+\frac{1}{2}-m\right)g(r)\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{\left|K-\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta), \qquad (5.3.4.8\text{c})$$

$$G_2(r,\theta)=g(r)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}(\cos\theta). \tag{5.3.4.8d}$$

至此尚有两个径向函数 $f(r)$和 $g(r)$待求.再利用波动方程在球坐标系中的四个分量形式

$$\begin{cases}-\mathrm{i}\left(\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)F_1(\boldsymbol{r})-\mathrm{i}e^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}-\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)F_2(\boldsymbol{r})\\ \quad-\left(\varepsilon_2+\dfrac{\alpha}{r}\right)G_1(\boldsymbol{r})=0, & (5.3.4.9\text{a})\\ -\mathrm{i}\left(\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)F_2(\boldsymbol{r})+\mathrm{i}e^{\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}+\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)F_1(\boldsymbol{r})\\ \quad+\left(\varepsilon_2+\dfrac{\alpha}{r}\right)G_2(\boldsymbol{r})=0, & (5.3.4.9\text{b})\\ -\mathrm{i}\left(\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)G_1(\boldsymbol{r})-\mathrm{i}e^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}-\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)G_2(\boldsymbol{r})\\ \quad-\left(\varepsilon_1+\dfrac{\alpha}{r}\right)F_1(\boldsymbol{r})=0, & (5.3.4.9\text{c})\\ -\mathrm{i}\left(\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)G_2(\boldsymbol{r})+\mathrm{i}e^{\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}+\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)G_1(\boldsymbol{r})\\ \quad+\left(\varepsilon_1+\dfrac{\alpha}{r}\right)F_2(\boldsymbol{r})=0. & (5.3.4.9\text{d})\end{cases}$$

把(5.3.4.8)式以及与它们相关的和 φ 角有关的因子代入波动方程(5.3.4.9)得到的四个等式分别为

$$\begin{cases}\left[\left(K+\dfrac{1}{2}-m\right)\cos\theta\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}+\sin\theta\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right]\left[\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}+(K+1)\dfrac{f}{r}\right]\\ \quad=\mathrm{i}\left(-K+\dfrac{1}{2}-m\right)\left(\varepsilon_2+\dfrac{\alpha}{r}\right)g\,\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}},\\ \left[\left(-K+\dfrac{1}{2}-m\right)\cos\theta\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}+\sin\theta\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right]\left[\dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}-(K-1)\dfrac{g}{r}\right]\\ \quad=\mathrm{i}\left(K+\dfrac{1}{2}-m\right)\left(\varepsilon_1+\dfrac{\alpha}{r}\right)f\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}},\\ \left[\left(K+\dfrac{1}{2}-m\right)\sin\theta\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}-\cos\theta\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right]\left[\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}+(K+1)\dfrac{f}{r}\right]\\ \quad=\mathrm{i}\left(\varepsilon_2+\dfrac{\alpha}{r}\right)g\,\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}},\\ \left[\left(-K+\dfrac{1}{2}-m\right)\sin\theta\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}-\cos\theta\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right]\left[\dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}-(K-1)\dfrac{g}{r}\right]\\ \quad=\mathrm{i}\left(\varepsilon_1+\dfrac{\alpha}{r}\right)f\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}.\end{cases}$$

(5.3.4.10)

由连带勒让德多项式的运算公式，(5.3.4.10)式简化成了

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}+(K+1)\dfrac{f}{r}=-\mathrm{i}\left(\varepsilon_2+\dfrac{\alpha}{r}\right)g,\\[2mm]\dfrac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}-(K-1)\dfrac{g}{r}=\mathrm{i}\left(\varepsilon_1+\dfrac{\alpha}{r}\right)f.\end{cases}\tag{5.3.4.11}$$

再令

$$\begin{cases}f(r)=A(r)\mathrm{e}^{-\varepsilon r},\\ g(r)=\mathrm{i}B(r)\mathrm{e}^{-\varepsilon r},\\ \varepsilon=\sqrt{-\varepsilon_1\varepsilon_2}=\dfrac{\sqrt{E_0^2-E^2}}{\hbar c}.\end{cases}\tag{5.3.4.12}$$

(5.3.4.11)式变成了

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}r}+(K+1)\dfrac{A}{r}-\alpha\dfrac{B}{r}=\varepsilon A+\varepsilon_2 B,\\[2mm]\dfrac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}r}-(K-1)\dfrac{B}{r}+\alpha\dfrac{A}{r}=\varepsilon B-\varepsilon_1 A.\end{cases}\tag{5.3.4.13}$$

用幂级数法解上式.设

$$\begin{cases}A(r)=r^{s-1}\displaystyle\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu(\varepsilon r)^\nu,\\ B(r)=r^{s-1}\displaystyle\sum_{\nu=0}^{\infty}b_\nu(\varepsilon r)^\nu.\end{cases}\tag{5.3.4.14}$$

把它们代入(5.3.4.13)式后为

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}[(\nu+s+K)a_\nu-\alpha b_\nu]\varepsilon^\nu r^{\nu+s-2}=\sum_{\nu=0}^{\infty}(\varepsilon a_\nu+\varepsilon_2 b_\nu)\varepsilon^\nu r^{\nu+s-1},$$

$$\sum_{\nu=0}^{\infty}[(\nu+s-K)b_\nu+\alpha a_\nu]\varepsilon^\nu r^{\nu+s-2}=\sum_{\nu=0}^{\infty}(\varepsilon b_\nu-\varepsilon_1 a_\nu)\varepsilon^\nu r^{\nu+s-1}.$$

由 r^{s-2} 项的系数为 0 得到

$$(s+K)a_0=\alpha b_0,\quad (s-K)b_0=-\alpha a_0.$$

故

$$s=\pm\sqrt{K^2-\alpha^2}.$$

考虑到 $r\to 0$ 时态函数的有界条件，$s<0$ 的解应舍去，所以

$$s=\sqrt{K^2-\alpha^2}.\tag{5.3.4.15}$$

其他各项系数之间的关系为

$$(\nu+s+1+K)a_{\nu+1}-\alpha b_{\nu+1}=a_\nu+\sqrt{\frac{E_0+E}{E_0-E}}\,b_\nu,$$

$$(\nu+s+1-K)b_{\nu+1}+\alpha a_{\nu+1}=b_\nu+\sqrt{\frac{E_0-E}{E_0+E}}\,a_\nu.$$

其中 $\nu=0,1,2,\cdots$. 解得了系数间的递推关系

$$\begin{cases} a_{\nu+1} = \dfrac{(\nu+s+1-K)\sqrt{E_0+E}+\alpha\sqrt{E_0-E}}{(\nu+1)(\nu+2s+1)}\left(\dfrac{a_\nu}{\sqrt{E_0+E}}+\dfrac{b_\nu}{\sqrt{E_0-E}}\right), \\ b_{\nu+1} = \dfrac{(\nu+s+1+K)\sqrt{E_0-E}-\alpha\sqrt{E_0+E}}{(\nu+1)(\nu+2s+1)}\left(\dfrac{a_\nu}{\sqrt{E_0+E}}+\dfrac{b_\nu}{\sqrt{E_0-E}}\right). \end{cases}$$

(5.3.4.16)

由于在 $r\to\infty$处态函数必须有界，因此径向函数(5.3.4.14)的级数应该中断成多项式. 假定级数中止在 ρ^{n_r+s-1}的项，那么需要

$$\frac{a_{n_r}}{\sqrt{E_0+E}}+\frac{b_{n_r}}{\sqrt{E_0-E}}=0.$$

这样由(5.3.4.16)式知

$$n_r+s-K+\alpha\sqrt{\frac{E_0-E}{E_0+E}}+n_r+s+K-\alpha\sqrt{\frac{E_0+E}{E_0-E}}=0.$$

解得了能量的本征值，也即氢原子的能级

$$E=E_0\frac{1}{\sqrt{1+\left(\dfrac{\alpha}{n_r+s}\right)^2}}. \tag{5.3.4.17}$$

氢原子的状态则为

$$\begin{cases} F_1(\boldsymbol{r},t) = \left(K-m+\dfrac{1}{2}\right)A(r)\mathrm{e}^{-\epsilon r}\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{\left|K+\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\ F_2(\boldsymbol{r},t) = A(r)\mathrm{e}^{-\epsilon r}\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{\left|K-\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\ G_1(\boldsymbol{r},t) = -\mathrm{i}\left(K+m-\dfrac{1}{2}\right)B(r)\mathrm{e}^{-\epsilon r}\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{\left|K-\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\ G_2(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{i}B(r)\mathrm{e}^{-\epsilon r}\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{\left|K-\frac{1}{2}\right|-\frac{1}{2}}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}. \end{cases}$$

(5.3.4.18)

二、氢原子的磁矩

原子的磁矩是一个常用的物理量，它在研究原子结构时起着重要作用. 例如当原子束通过不均匀的磁场后分成了数束的施特恩-格拉赫实验；把中性原子放入磁场中发光产生的塞曼分裂等，曾是人们认识原子结构的关键实验，这些都与原子的磁矩有关，原子的磁矩是由原子内的电子运动产生的，原子核本身的磁矩因很小，在研究原子结构时可以忽略.

在氢原子中，电子的概率密度是

$$\psi^{\dagger}\psi=\left\{\left[\left(K-m+\frac{1}{2}\right)^{2}\left(\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right)^{2}+\left(\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right)^{2}\right]A^{2}\right.$$
$$\left.+\left[\left(K+m-\frac{1}{2}\right)^{2}\left(\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right)^{2}+\left(\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right)^{2}\right]B^{2}\right\}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}.$$

电子的概率流密度是

$$\begin{cases}v_r=v_\theta=0,\\ v_\varphi=\mathrm{i}c[(G_2^*F_1+F_2^*G_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}-(F_1^*G_2+G_1^*F_2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}]\\ \quad=2c\left[\left(K-m+\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right.\\ \qquad\left.+\left(K+m-\frac{1}{2}\right)\mathrm{P}^{m+\frac{1}{2}}_{|K+\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\mathrm{P}^{m-\frac{1}{2}}_{|K-\frac{1}{2}|-\frac{1}{2}}\right]AB\mathrm{e}^{-2\epsilon r}.\end{cases}\tag{5.3.4.19}$$

应用连带勒让德多项式的积分公式算得

$$\iiint\psi^{\dagger}\psi r^{2}\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=4\pi\frac{\left(|K|+m-\frac{1}{2}\right)^{2}!}{\left(|K|-m+\frac{1}{2}\right)^{2}!}\int_0^\infty r^{2}(A^{2}+B^{2})\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r,$$

$$\int_0^\pi\int_0^\infty\pi r^{3}\sin^{2}\theta v_\varphi\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta=\frac{16\pi mkc}{4K^{2}-1}\frac{\left(|K|+m-\frac{1}{2}\right)!}{\left(|K|-m+\frac{1}{2}\right)!}\int_0^\infty r^{3}AB\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r.$$

于是氢原子的磁矩

$$\mu_z=-e\frac{\int_0^\pi\int_0^\infty\pi r^{3}\sin^{2}\theta v_\varphi\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta}{\iiint\psi^{\dagger}\psi r^{2}\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi}=\frac{4mKce}{1-4K^{2}}\frac{\int_0^\infty r^{3}AB\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r}{\int_0^\infty r^{2}(A^{2}+B^{2})\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r}.\tag{5.3.4.20}$$

积分

$$\int_0^\infty r^{3}A^{2}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r=\frac{1}{2\epsilon}\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}(r^{3}A^{2})}{\mathrm{d}r}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r=\frac{1}{2\epsilon}\int_0^\infty\left(3r^{2}A^{2}+2r^{3}A\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}r}\right)\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r.$$

把(5.3.4.13)式代入上式的右端得

$$\int_0^\infty r^{3}A^{2}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r$$
$$=\frac{1}{2\epsilon}\int_0^\infty\left\{3r^{2}A^{2}+2r^{3}\left[\epsilon A^{2}-(K+1)\frac{A^{2}}{r}+\left(\epsilon_2+\frac{\alpha}{r}\right)AB\right]\right\}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r.$$

同样方法可求得

$$\int_0^\infty r^{3}B^{2}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r$$
$$=\frac{1}{2\epsilon}\int_0^\infty\left\{3r^{2}B^{2}+2r^{3}\left[\epsilon B^{2}+(K-1)\frac{B^{2}}{r}-\left(\epsilon_1+\frac{\alpha}{r}\right)AB\right]\right\}\mathrm{e}^{-2\epsilon r}\mathrm{d}r.$$

消去等式两端相同的项得到

$$\int_0^\infty [(1-2K)r^2A^2 + 2\alpha r^2 AB + 2\varepsilon_2 r^3 AB]\mathrm{e}^{-2\varepsilon r}\,\mathrm{d}r = 0,$$

$$\int_0^\infty [(1+2K)r^2B^2 - 2\alpha r^2 AB - 2\varepsilon_1 r^3 AB]\mathrm{e}^{-2\varepsilon r}\,\mathrm{d}r = 0.$$

两式相加后为

$$\int_0^\infty \left[r^2(A^2+B^2) + 2Kr^2(B^2-A^2) + \frac{4E_0}{\hbar c}r^3 AB\right]\mathrm{e}^{-2\varepsilon r}\,\mathrm{d}r = 0.$$

记

$$\Delta = \frac{\int_0^\infty r^2 B^2 \mathrm{e}^{-2\varepsilon r}\,\mathrm{d}r}{\int_0^\infty r^2 A^2 \mathrm{e}^{-2\varepsilon r}\,\mathrm{d}r}. \tag{5.3.4.21}$$

则氢原子的磁矩式(5.3.4.20)成为

$$\mu_z = \frac{mK}{4K^2-1}\frac{\hbar c^2 e}{E_0}\left(1-2K\frac{1-\Delta}{1+\Delta}\right). \tag{5.3.4.22}$$

在 Δ 中，A 和 B 都是有 n_r+1 项的多项式，原则上虽都可以精确地算出，但计算起来却过于烦琐了，好在从 A 和 B 的系数可以知道，Δ 总是 α^2 量级及更高级的小量.

用朗德 g 因子来表示氢原子的磁矩

$$g_j = -\frac{\hbar\mu_z}{J_z\mu_{\mathrm{B}}} = \frac{2K}{1-4K^2}\left(1-2K\frac{1-\Delta}{1+\Delta}\right). \tag{5.3.4.23}$$

其中 $\mu_{\mathrm{B}}=\dfrac{e\hbar}{2m_e}$是玻尔磁子. 当略去 α^2 量级及更高级的小量后

$$g_j \approx \frac{2K}{1+2K} = \begin{cases} \dfrac{2(l+1)}{2l+1}, & \text{当 } K=-l-1<0 \text{ 时}\left(j=l+\dfrac{1}{2}\right), \\ \dfrac{2l}{2l+1}, & \text{当 } K=l>0 \text{ 时}\left(j=l-\dfrac{1}{2}\right). \end{cases} \tag{5.3.4.24}$$

这就是当今量子力学中用自旋轨道耦合理论给出的公式：

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1)+\frac{3}{4}-l(l+1)}{2j(j+1)}.$$

上述的讨论表明，现行量子力学中所用的自旋轨道耦合，理论所算得的氢原子的磁矩是忽略了 α^2 量级的结果. 严格的氢原子的磁矩不仅与量子数 j,l 有关，在小量项中还与主量子数 n 有关. 例如在 $n_r=0$ 和 $n_r=1$ 的情形，算得

$$\begin{cases} g_j = \dfrac{2K}{1-4K^2}(2\sqrt{K^2-\alpha^2}+1) \approx \dfrac{2K}{2K+1}\left[1-\dfrac{\alpha^2}{K(2K-1)}\right], \\ \qquad n_r = 0, K = -1, -2, -3, \cdots, \\ g_j = \dfrac{2K}{4K^2-1}\left[\dfrac{2K(\sqrt{K^2-\alpha^2}+1)}{K^2+1+2\sqrt{K^2-\alpha^2}}-1\right] \\ \quad \approx \dfrac{2K}{2K+1}\left[1-\dfrac{K\alpha^2}{(2K-1)(|K|+1)^2}\right], \quad n_r = 1, K = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots. \end{cases}$$

三、算符 $\hat{K}$ 的物理意义

$$\hat{K} = \left[\mathrm{i} + \frac{1}{\hbar}(\hat{L}_z\boldsymbol{i} + \hat{L}_y\boldsymbol{j} + \hat{L}_x\boldsymbol{k})\right]\boldsymbol{i}_2 = \mathrm{i}\left(1 + \frac{2}{\hbar^2}\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\right)\boldsymbol{i}_2$$

$$= \mathrm{i}\left[1 + \frac{1}{\hbar^2}(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2)\right]\boldsymbol{i}_2.$$

$\hat{K}$ 的本征方程即是

$$\left(1 + \frac{\hat{J}^2 - \hat{L}^2}{\hbar^2} - \frac{3}{4}\right)\psi = \mathrm{i}K\boldsymbol{i}_2\psi.$$

在氢原子中,电子是在球对称的库仑场中运动的,所以除了角动量的 z 向分量守恒外,角动量的平方也守恒,有本征方程

$$\hat{J}^2\psi = j(j+1)\hbar^2\psi = \left(K^2 - \frac{1}{4}\right)\hbar^2\psi.$$

其中

$$j = |K| - \frac{1}{2}. \tag{5.3.4.25}$$

所以 $\hat{K}$ 的本征方程相当于方程

$$\left(-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + K^2 - \mathrm{i}K\boldsymbol{i}_2\right)\psi = 0.$$

这样态函数中前两个函数 F_1, F_2 和后两个函数 G_1, G_2 分别满足

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + K(K+1)\right]F(r,\theta,\varphi) = 0,$$

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} - (K-1)K\right]G(r,\theta,\varphi) = 0.$$

说明前述解中含 θ 和 φ 的因子的正确性.

以上讨论表明,算符 $\hat{K}$ 实际上与自旋轨道的耦合项有关,归根结底又是与角动量的平方有关. 其量子数 K 实际上是表示了角动量的量子数 $K = \pm\left(j + \dfrac{1}{2}\right)$.

5.3.5 单旋量解法

狄拉克方程能够严格地求解的情形并不多，因此必须设法寻求近似求解它的方法. 在相对论性波动方程建立之前，人们已经直接根据物理观念建立了一些非相对论性的波动方程，而且发展出了一系列处理它们的近似方法. 现在就可以根据狄拉克方程对它们进行甄别和鉴定.

一、单旋量方程

狄拉克方程的态函数

$$\psi = (F_1 u_1 + F_2 v_1) u_2 + (G_1 u_1 + G_2 v_1) v_2 \tag{5.3.5.1}$$

称为双旋量，它由两个(单)旋量 $F_1 u_1 + F_2 v_1$ 和 $G_1 u_1 + G_2 v_1$ 合在一起构成.

考虑荷电 q 的微观粒子在电磁场和其他势场中的运动，其哈密顿算符为

$$\hat{H} = U - \mathrm{i}E_0 \boldsymbol{i}_2 - c[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}]\boldsymbol{k}_2. \tag{5.3.5.2}$$

其中，$\boldsymbol{a}$ 是电磁场的矢势，U 中包含了电磁场中的势能 $q\varphi$ 和其他势能.

把狄拉克方程

$$(\hat{E} - \hat{H})\psi = 0 \tag{5.3.5.3}$$

展开成两个(单)旋量所满足的联立方程

$$\begin{cases} (\hat{E} - U - E_0)(F_1 u_1 + F_2 v_1) = -\mathrm{i}c[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} \\ \qquad + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}](G_1 u_1 + G_2 v_1), & (5.3.5.4a) \\ (\hat{E} - U + E_0)(G_1 u_1 + G_2 v_1) = -\mathrm{i}c[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} \\ \qquad + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}](F_1 u_1 + F_2 v_1). & (5.3.5.4b) \end{cases}$$

对于定态，(5.3.5.4b)式可成为

$$G_1 u_1 + G_2 v_1 = -\frac{\mathrm{i}c}{E + E_0 - U}[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}](F_1 u_1 + F_2 v_1). \tag{5.3.5.5a}$$

将它代入(5.3.5.4a)式的右端

$$\begin{aligned} &(E - E_0 - U)(F_1 u_1 + F_2 v_1) \\ &= -c^2[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}] \\ &\quad \frac{(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}}{E + E_0 - U}(F_1 u_1 + F_2 v_1). \end{aligned} \tag{5.3.5.5b}$$

此式右端的方括号中的算符分成了对分子的作用和对分母的作用两项，对分子的作用为

$$[(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}][(\hat{p}_z - qa_z)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y - qa_y)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x - qa_x)\boldsymbol{k}]$$

$$
\begin{aligned}
=&-[(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}+(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}+(\hat{p}_x-qa_x)\boldsymbol{k}]\\
&\cdot[(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}+(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}+(\hat{p}_x-qa_x)\boldsymbol{k}]\\
&+[(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}+(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}+(\hat{p}_x-qa_x)\boldsymbol{k}]\\
&\times[(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}+(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}+(\hat{p}_x-qa_x)\boldsymbol{k}].
\end{aligned}
$$

要注意的是叉乘项并不为0,例如

$$
\begin{aligned}
&(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}\times(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}+(\hat{p}_y-qa_y)\boldsymbol{j}\times(\hat{p}_z-qa_z)\boldsymbol{i}\\
&\quad=[\hat{p}_z\hat{p}_y-qa_y\hat{p}_z-q(\hat{p}_za_y)-qa_z\hat{p}_y+q^2a_za_y]\boldsymbol{k}\\
&\qquad-[\hat{p}_y\hat{p}_z-qa_z\hat{p}_y-q(\hat{p}_ya_z)-qa_y\hat{p}_z+q^2a_ya_z]\boldsymbol{k}\\
&\quad=-\mathrm{i}\,\hbar q\left(\frac{\partial a_z}{\partial y}-\frac{\partial a_y}{\partial z}\right)\boldsymbol{k}=2q\hat{S}_xB.
\end{aligned}
$$

其他可类似地算出,所以对分子的作用项为

$$
c^2(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2-2qc^2\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}.
$$

对分母的作用后为

$$
\frac{1}{(E+E_0-U)^2}[(\hat{p}_x\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_z\boldsymbol{k})U]=\frac{2\mathrm{i}}{\hbar(E+E_0-U)^2}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}U).
$$

所以(5.3.5.5b)式成为

$$
\begin{aligned}
&\Big\{E-E_0-U-\frac{c^2}{E+E_0-U}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2+\frac{2qc^2}{E+E_0-U}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}\\
&\quad-\frac{4c^2}{(E+E_0-U)^2\hbar^2}[\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}U)][\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})]\Big\}(F_1u_1+F_2v_1)=0.
\end{aligned}
\tag{5.3.5.6a}
$$

同时(5.3.5.5a)式成为

$$
G_1u_1+G_2v_1=\frac{2c}{(E+E_0-U)\hbar}[\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})](F_1u_1+F_2v_1).
\tag{5.3.5.6b}
$$

这样人们就可只求解方程(5.3.5.6a),求出第一个旋量,然后再由(5.3.5.6b)式求出第二个旋量.

二、非相对论近似

在粒子的速度较低时,有

$$
|E-E_0|\ll E_0,\quad |U(\boldsymbol{r})|\ll E_0.
$$

这样可作低速近似

$$
\begin{cases}
\dfrac{1}{E+E_0-U}\approx\dfrac{1}{2E_0}-\dfrac{E-E_0-U}{4E_0^2},\\[2ex]
\dfrac{1}{(E+E_0-U)^2}\approx\dfrac{1}{4E_0^2}.
\end{cases}
\tag{5.3.5.7}
$$

这样(5.3.5.6)式的二级近似为

$$\begin{cases}\left\{E-E_0-U-\frac{c^2}{2E_0}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2+\frac{qc^2}{E_0}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}+\frac{E-E_0-U}{4E_0^2}c^2(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2\right.\\ \left.\quad-\frac{E-E_0-U}{2E_0^2}qc^2\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}-\frac{c^2}{E_0^2\hbar^2}[\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}U)][\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})]\right\}\\ \quad\cdot(F_1u_1+F_2v_1)=0, \qquad (5.3.5.8a)\\ G_1u_1+G_2v_1=\frac{c}{E_0\hbar}[\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})](F_1u_1+F_2v_1). \qquad (5.3.5.8b)\end{cases}$$

再由一级近似可得

$$E-E_0-U\approx\frac{c^2}{2E_0}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2.$$

代入(5.3.5.8a)式使之成为

$$\left\{E-E_0-U-\frac{c^2}{2E_0}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2+\frac{qc^2}{E_0}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}+\frac{c^4}{8E_0^3}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^4-\frac{qc^4}{4E_0^3}(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B})(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})^2\right.$$
$$\left.-\frac{c^2}{E_0^2\hbar^2}[\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}U)][\hat{\boldsymbol{S}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{a})]\right\}(F_1u_1+F_2v_1)=0. \qquad (5.3.5.9)$$

(1) 自由粒子

$$U=0,\quad \boldsymbol{B}=0\quad(\boldsymbol{a}=0).$$

(5.3.5.9)式的一级近似为

$$\left(E-E_0-\frac{c^2}{2E_0}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)(F_1u_1+F_2v_1)=0. \qquad (5.3.5.10)$$

这就是自由粒子的薛定谔方程,它可以用 F_1 或 F_2 中任一个作波函数.

狄拉克方程中的波函数由两个旋量 $F_1u_1+F_2v_1$ 和 $G_1u_1+G_2v_1$ 构成,解得了 $F_1u_1+F_2v_1$ 后,还需要一个关系由它求出 $G_1u_1+G_2v_1$,这就导致了螺旋度观念的诞生.所以非相对论量子力学不只是数量上的近似,而且还会丢失重要的物理观念.

(2) 恒定电磁场中的电子

$$U=-e\varphi,\quad q=-e.$$

(5.3.5.9)式取一级近似为

$$\left[E-E_0+e\varphi-\frac{c^2}{2E_0}(\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{a})^2-\frac{ec^2}{E_0}\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}\right](F_1u_1+F_2v_1)=0. \qquad (5.3.5.11)$$

这就是泡利方程.其中

$$-\frac{ec^2}{E_0}\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{\boldsymbol{\mu}}_s \qquad (5.3.5.12)$$

为电子的自旋磁矩.哈密顿算符中增加了 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s\cdot\boldsymbol{B}$ 项是自旋理论中电子“内禀”着自

旋磁矩的主要根据.

(3) 中心力场中的粒子

$$\begin{cases}\boldsymbol{E}=0, \quad \boldsymbol{B}=0 \quad (\varphi=0, \boldsymbol{a}=0), \\ U(\boldsymbol{r})=U(r).\end{cases}$$

(5.3.5.9)式中

$$\hat{\boldsymbol{S}} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} U)=-\mathrm{i} \hbar \frac{\mathrm{d} U}{\mathrm{d} r} \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{r},$$

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{S}} \cdot (\hat{\boldsymbol{p}} U)](\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) &= \frac{\mathrm{i} \hbar^{3}}{4} \frac{\mathrm{d} U}{r \mathrm{d} r}(z \boldsymbol{i}+y \boldsymbol{j}+x \boldsymbol{k})(\hat{p}_{z} \boldsymbol{i}+\hat{p}_{y} \boldsymbol{j}+\hat{p}_{x} \boldsymbol{k}) \\ &= \frac{\mathrm{i} \hbar^{3}}{4} \frac{\mathrm{d} U}{r \mathrm{d} r}(-\boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}-\hat{L}_{z} \boldsymbol{i}-\hat{L}_{y} \boldsymbol{j}-\hat{L}_{x} \boldsymbol{k}) \\ &= \frac{\hbar^{2}}{2} \frac{\mathrm{d} U}{r \mathrm{d} r}\left(\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}-\frac{\mathrm{i} \hbar}{2} \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}\right).\end{aligned}$$

(5.3.5.9)式为

$$\left[E-E_{0}-U(r)-\frac{c^{2}}{2 E_{0}} \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}+\frac{c^{4}}{8 E_{0}^{3}} \hat{\boldsymbol{p}}^{4}-\frac{c^{2}}{2 E_{0}^{2}} \frac{\mathrm{d} U}{r \mathrm{d} r} \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}} + \frac{\hbar^{2} c^{2}}{4 E_{0}^{2}} \frac{\mathrm{d} U}{\mathrm{d} r} \frac{\partial}{\partial r}\right](F_{1} u_{1}+F_{2} v_{1})=0. \tag{5.3.5.13}$$

上式中的最后一项一般来说总可以忽略.用此式去处理氢原子光谱的精细结构,所得结果与实践符合得很好.

把(5.3.5.13)式与最初建立的薛定谔方程

$$\left(E-E_{0}-U-\frac{c^{2}}{2 E_{0}} \hat{\boldsymbol{p}}^{2}\right) \psi=0$$

作比较,发现(5.3.5.13)式多出了两项,其中项$\frac{c^{4}}{8 E_{0}^{3}} \hat{\boldsymbol{p}}^{4}$是动能的相对论效应,项$-\frac{c^{2}}{2 E_{0}^{2}} \frac{\mathrm{d} U}{r \mathrm{d} r} \hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}$是著名的自旋轨道耦合能,它也是一种相对论效应,与动能的相对论效应有着相同的数量级.在自旋理论创立之前,人们基于薛定谔方程而考虑进动能的相对论修正后处理氢原子光谱所得结果,反而不如用索末菲椭圆轨道的玻尔老量子论考虑进相对论修正后所得结果来得精确,原因正在于没有意识到$\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}$项的贡献.所以,从狄拉克方程中导出了$\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}$项成了电子"内禀"着自旋角动量的最主要的一个理论依据.

三、自旋的本质

1. 自旋理论

用非相对论性的薛定谔方程去处理微观粒子的运动时,为了与实践相符,必须

添加自旋理论.

自乌伦贝克-古德斯米特类比地球围绕太阳运动的图像假设电子也存在着自旋运动以来,一方面很好地解释了诸如施特恩-格拉赫实验,原子光谱的精细结构,正常、反常塞曼效应等等著名的实验,使量子理论又上了一个层次. 另一方面,电子自转的观念又与相对论中时空当量 c 是物质的极限速率的事实相违背. 因此自旋角动量和自旋磁矩的物理本质到底是什么始终困扰着人们. 狄拉克方程的建立使人们明白了自旋角动量和自旋磁矩是一种相对论效应,是从相对论性波动方程中必然导出的结果. 于是人们设法把乌伦贝克-古德斯米特唯象的自旋假设进行修正,把它提升为自旋理论.

现今量子理论中流行的自旋理论概括起来是:

(1) 每个电子内禀着自旋角动量 $\hat{\boldsymbol{S}}$,它在空间任意固定的方向 $\boldsymbol{e}$ 上的投影只可能取两个数值,即

$$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{e}=\pm\frac{\hbar}{2}.$$

(2) 每个电子内禀着自旋磁矩 $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s$,它与自旋角动量 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 的关系是

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s=\frac{-ec^2}{E_0}\hat{\boldsymbol{S}}=-2\mu_{\mathrm{B}}\frac{\hat{\boldsymbol{S}}}{\hbar}.$$

因此自旋磁矩在空间任意固定方向 $\boldsymbol{e}$ 的投影也只能取两个数值

$$\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{e}=\mp\frac{e\hbar c^2}{2E_0}=\mp\mu_{\mathrm{B}}.$$

常量 μ_{B} 为玻尔磁子. “内禀”二字是指他们是微观粒子的一种固有性质,并不是因粒子在现实空间中的运动而产生. 种类不同的粒子,它们的自旋角动量和自旋磁矩的大小可能有差别,然而微观粒子都具有这种基本属性却是共同的.

(3) 在现实的位形空间之外,存在着一个自旋空间,自旋角动量和自旋磁矩是自旋空间的物理量.

这一观念是因为用“内禀”二字回避了自转的观念,认为它们不是粒子在现实的位形空间中运动而产生的物理量,那么它们是什么空间的物理量呢? 人们凭借丰富的想象力创造性地构思出了一个自旋空间来安置它们.

(4) 自旋角动量和自旋磁矩与轨道角动量和轨道磁矩耦合成“总”的角动量和“总”的磁矩,这才是微观粒子具有的角动量和磁矩.

这个自旋理论诠释了微观粒子所具有的自旋性质,也比较精确地处理了微观粒子有关的问题,因此在人们认识微观世界的历程中作出了重大的贡献. 然而物理学是一门严谨的科学理论,这个自旋理论能在物理学中容身吗?

2. 对自旋理论的质疑

(1) 两个本质不同空间的物理量可以耦合出一个总的物理量,这一理念出现

在严谨的物理学中显得非常怪诞，耦合出来的总物理量应该归属于哪个空间呢？

(2) 自由电子在其运动方向上存不存在着磁矩？自旋理论的回答是有，且大小为$\pm\mu_B$，相对论理论的回答则是没有.

(3) 如前文所述，电子在均匀恒定磁场或中心力场中所形成的磁矩是电子在现实的位形空间中围绕空间轴具有回转速度v_φ而产生的，因此理所当然地是轨道磁矩. 自旋理论却否认这一严格的结果是轨道磁矩，而把由低速近似下算得的结果当作了全部的轨道磁矩，这岂非歪曲了真相？

(4) 现实的位形空间的某种对称性对应着现实的位形空间中的某一物理量守恒，这是客观规律. 自旋理论却认为，位形空间的旋转对称性对应的却是粒子的“总”角动量守恒！这难道不是对这一客观规律的曲解？

总之，我们认为，把乌伦贝克-古德斯米特的自转假说修改成自旋理论，构思出一个“自旋空间”，并不能使理论前进一步，只不过是增加了神秘色彩而已.

3. 自旋的本质

我们否定存在所谓的自旋空间，但并不否定自旋是微观粒子的一个基本属性这一客观事实. 微观粒子的状态在非相对论理论中用一个函数来描述，在相对论理论中需用几个函数才能描述. 在坐标系作空间转动时，协变性要求状态函数发生变换

$$\psi' = \Lambda\psi.$$

这样，轨道角动量在旋转轴方向的投影算符也相应地从$\hat{L}_z$变成了

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Lambda}{\partial\varphi}\bigg|_{\varphi=0}.$$

与非相对论理论相比，增加了一项

$$\hat{S}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Lambda}{\partial\varphi}\bigg|_{\varphi=0}.$$

这一项取名为自旋，波动方程不同，坐标系空间转动时波函数变换的四元数Λ也不同，因此自旋也不同. 不同种类的粒子遵从着不同的波动方程，因此有着不同的自旋，所以自旋是粒子的一个客观性质.

与位形空间的旋转对称性相对应的守恒量是角动量$\hat{\boldsymbol{J}}$，所以$\hat{\boldsymbol{J}}$纯粹是位形空间的物理量，即相对论性的轨道角动量，它的非相对论极限是$\hat{\boldsymbol{L}}$，虽然它被现今的量子理论误认为是轨道角动量的全部，但它只是轨道角动量中的一部分，是非相对论的轨道角动量，相对论轨道角动量$\hat{\boldsymbol{J}}$与其非相对论极限$\hat{\boldsymbol{L}}$之差

$$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{J}} - \hat{\boldsymbol{L}}$$

就是自旋角动量，所以自旋角动量是轨道角动量的相对论效应.

还可从轨道角动量的量子化过程来看出自旋的来源，经典的轨道角动量的定

义是 $\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v}$，把它量子化.

遵从狄拉克方程的微观粒子，其质量算符为

$$\hat{m} = -\mathrm{i}m_0\boldsymbol{i}_2 - \frac{1}{c}(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.$$

速度算符为

$$\begin{cases} \hat{v}_x = -c\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2, \\ \hat{v}_y = -c\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2, \\ \hat{v}_z = -c\boldsymbol{i}\boldsymbol{k}_2. \end{cases}$$

容易验证

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \frac{1}{4}(\boldsymbol{r}\times\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}} - \hat{m}\hat{\boldsymbol{v}}\times\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{v}}\hat{m} - \hat{\boldsymbol{v}}\times\boldsymbol{r}\hat{m}) = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}.$$

此式表明，自旋的出现是由于质量的相对论效应使它从静质量变成了相对论性质量而成为算符，又由于质量、速度和位矢三个算符并不对易而产生了量子效应，所以自旋是相对论效应导致的量子效应，此式也明显地体现了 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 是轨道角动量算符这个物理本质.

以上我们对现今自旋理论中的物理观念进行了否定，指出了自旋的来源以及它的物理本质. 但是对于自旋理论既没有否定它在量子理论发展过程中起到的重大作用，也没有否定它仍可以作为一种求解微观粒子运动的近似方法，继续用来计算粒子的能量、角动量、磁矩等力学量的数值. 仅仅强调，在继续使用它时，应该避免使用现今自旋理论中那些错误的物理观念.

第 6 章　相对论性量子力学(Ⅱ)

§6.1　建立波动方程的方法

一、已经应用的波动方程

在现今的量子理论中，已经使用了数种波动方程用以描述微观粒子的运动. 有薛定谔方程

$$\hat{E}\psi = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_0} + U\right)\psi. \tag{6.1.1}$$

以及与此完全等价的海森伯方程. 有泡利方程

$$(\hat{E} - q\varphi)\psi = \left[\frac{1}{2m_0}(\hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{a})^2 - \frac{q\hbar}{2m_0}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi. \tag{6.1.2}$$

有狄拉克方程

$$\hat{E}\psi = (c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta E_0)\psi \tag{6.1.3}$$

和克莱因-戈尔登方程

$$(\hat{E}^2 - c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - E_0^2)\psi = 0. \tag{6.1.4}$$

狄拉克方程是相对论性的波动方程，描述的是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子. 克莱因-戈尔登方程也是相对论性的波动方程，描述的是自旋为 0 的介子. 若其中的静质能 $E_0=0$，态函数是闵氏空间中的四矢量，那么它也被认为是用来描述光子的波动方程，其自旋为 1.

这几种方程之间有着密切的联系. 如上章所述，薛定谔方程(6.1.1)和泡利方程(6.1.2)都是狄拉克方程(6.1.3)在不同情况下的低速近似. 而下文又将说明，狄拉克方程(6.1.3)也是在把克莱因-戈尔登方程(6.1.4)进行因式分解后得到的. 这就表明，上述种种波动方程都源于克莱因-戈尔登方程，是克莱因-戈尔登方程在不同情况下的表现形式.

二、建立波动方程的思路

微观粒子波动方程的建立过程与宏观动力学方程的建立过程是很不相同的.

经典的动力学方程主要是靠人们对大自然的观察以及有意识的实验，在与人类的大小大致相当的范围内从看得见、摸得着的经验事实中总结出来的，因此这些规律比较直观，比较容易为人们所接受. 微观粒子的运动规律则因其微而使人们难于直接观察，因而不得不更多地凭借人类的思维能力，去试探，去推测，先把方程建立起来，再由方程所导出的结果与实践相对照，从而判断它的是与非. 以上一些波动方程大致就是这样建立起来的.

然而这并不是说怎样建立微观粒子的波动方程就完全没有脉络可循. 以薛定谔方程和克莱因-戈尔登方程为例，他们的建立过程可简单归纳为：应用经典力学中所导出的能量关系式，

$$\begin{cases} E = \dfrac{p^2}{2m_0} + U \quad \text{—— 非相对论力学，} \\ E^2 = c^2 p^2 + E_0^2 \quad \text{—— 相对论力学.} \end{cases} \tag{6.1.5}$$

把其中的能量和动量分别用与它们相对应的运算符号来替代

$$\begin{cases} E \to \hat{E} \equiv \mathrm{i}\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}, \\ \boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} \equiv -\mathrm{i}\hbar \nabla. \end{cases} \tag{6.1.6}$$

然后把(6.1.5)式的两端作用在描述微观粒子状态的函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 上，就分别得到了非相对论和相对论的波动方程(6.1.1)和(6.1.4)，通过实践证明从它们所导出的结果是正确的.

依照上述的过程为什么就能正确地建立了微观粒子的波动方程呢？要彻底地说清其中的原因是困难的，但从基本的量子观念出发可以大致分析一下这一过程的思路：

(1) 微观粒子本质的特征是具有波粒二象性，这是它们与宏观粒子的根本区别.

(2) 波动性需用一个时空分布函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述，称它为状态函数，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 随时空的变化规律描述了微观粒子的运动规律.

(3) 状态函数的模方 $\psi^*\psi$ 表示的是微观粒子在空间的概率分布，称为对态函数的统计诠释. 这种量子观念中的或然论与经典观念的决定论是两种观念的本质区别所在.

(4) 状态函数的变化必须要由一个运算符号作用在它上面才能发生. 由于波动性和粒子性要体现在同一个微观粒子上，既然态函数反映了粒子的波动性，那么使态函数发生变化的运算符号必定与粒子性相关. 这样反映粒子性的物理量就用一个运算符号来表示，它在状态中的平均值就是反映粒子性的该物理量的取值.

(5) 对于自由的微观粒子，体现粒子性的物理量——四动量，与体现波动性的物理量——四波矢假设存在着正比关系

$$P \equiv \hbar K.$$

即

$$\begin{cases} E = \hbar\omega, \\ \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}. \end{cases} \tag{6.1.7}$$

这就是著名的**德布罗意假设**.

(6) 自由的微观粒子因其有确定的能量和动量,从粒子性的一面看它应做匀速直线运动,从波动性来看,比较合理地是用平面波来描述它

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}.$$

这样,由

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \hbar\omega\psi(\boldsymbol{r},t) = E\psi(\boldsymbol{r},t),$$

$$-\mathrm{i}\hbar\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) = \hbar\boldsymbol{k}\psi(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

可以得到(6.1.6)式那样的代换.

(7) 微观粒子的波动方程是由运算符号作用在状态函数之上形成的.由于其中的算符代表着粒子性的物理量,因此波动方程中的算符之间必须满足经典力学中已知的规律.

循着上述的思维逻辑,就可能建立起波动方程了.

三、建立波动方程的方法

把非相对论力学中的能量定理(6.1.5)用算符代替,称为量子化.再作用在态函数上,就得到了薛定谔方程,所以它是非相对论性的波动方程.

把相对论力学中的能量定理(6.1.5)量子化,作用在态函数上,得到了克莱因-戈尔登方程,所以它是相对论性的波动方程.人们原本期望能够用克莱因-戈尔登方程来描述相对论性微观粒子的运动规律,然而它却与量子观念的菁华之一:态函数的统计诠释相矛盾.

在克莱因-戈尔登方程中,态函数对时间是二阶导数的.任何时刻的态函数$\psi(\boldsymbol{r},t)$的确定,既需要知道初始时刻的态函数$\psi(\boldsymbol{r},t)|_{t=0}$,还需要知道态函数在初始时刻的一阶导数$\left.\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right|_{t=0}$,这样就使态函数的模方$\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$在某些时刻有了出现小于0的可能性.负的概率在物理上是根本不可能的,与客观规律相悖的.所以,微观粒子的波动方程原则上对时间总应该是一阶导数的,直接把克莱因-戈尔登方程作为微观粒子的波动方程并不正确.

克服这一困难的办法是将(6.1.4)式进行因式分解,写成

$$(\hat{E}+\hat{H})(\hat{E}-\hat{H})\psi = 0. \tag{6.1.8}$$

使

$$\hat{H}^2 = c^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2 + E_0^2. \tag{6.1.9}$$

这样,只要

$$(\hat{E} - \hat{H})\psi = 0, \tag{6.1.10}$$

克莱因-戈尔登方程(6.1.4)也就得到了满足.而方程(6.1.10)就是对时间一阶导数的波动方程.

怎样进行(6.1.8)式那样的因式分解成了建立相对论性波动方程的关键.一种显见的分解方式是

$$\hat{H} = \pm \sqrt{c^2 \hat{\boldsymbol{p}}^2 + E_0^2}. \tag{6.1.11}$$

如果(6.1.11)式的左右两端直接是物理量,则是有意义的.但现在他们是算符,$\hat{\boldsymbol{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$ 固然有意义,不过把它加上常量后再开根,然后再作用在态函数上将怎样进行运算人们并不知晓,因此(6.1.11)式那样的分解没有意义,而且易证,即使把(6.1.9)式看成是复数领域的等式,$\hat{H}$ 也是无解的.

是狄拉克显示出了他的杰出才能,创造性地把(6.1.9)式当做是 4×4 矩阵领域的等式,使得因式分解成为可能.狄拉克分解出的结果是

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + \beta E_0. \tag{6.1.12}$$

由此得到了狄拉克方程.因为 $\hat{H}$ 成了 4×4 的矩阵,态函数也自然地要相应地变成 4×1 矩阵了.与狄拉克方程有关的内容已在上一章中作了较全面的介绍,这里不再赘述.

狄拉克的这个开创性思维不仅为物理学留下了他的方程,奠定了相对性量子理论的基石,同时也给予人们重要的启迪:还存不存在着其他的因式分解方法?比如(6.1.9)式能不能在 2×2 矩阵领域进行因式分解?在 4×4 矩阵领域是否只有狄拉克所作的那样一种分解方式?等等.

笔者的推测是,只要(6.1.9)式存在着一种因式分解方式,就能建立起一个波动方程,也就对应着一类微观粒子;反之,任何一类微观粒子,都应该有一个对时间为一阶导数的波动方程,而这个波动方程都应该可以从克莱因-戈尔登方程的因式分解中导出.这种推测是否正确当然应由实践来检验.

为了将克莱因-戈尔登方程进行因式分解,由于它是相对论性的波动方程,因此用四元数的数学工具将是比较方便的.

§6.2 中微子的波动方程

6.2.1 中微子的波动方程

一、方程的建立

根据建立波动方程的基本法则，将(5.2.10)式在一级四元数领域求解.

假设哈密顿 $\hat{H}$ 是一级四元数型的算符

$$\hat{H} = \hat{h}_0 + \hat{\boldsymbol{h}}. \tag{6.2.1.1}$$

它的平方

$$\hat{H}^2 = \hat{h}_0^2 - \hat{\boldsymbol{h}}^2 + \hat{h}_0\hat{\boldsymbol{h}} + \hat{\boldsymbol{h}}\hat{h}_0.$$

代入(5.2.10)式，有

$$\begin{cases} \hat{h}_0\hat{\boldsymbol{h}} + \hat{\boldsymbol{h}}\hat{h}_0 = 0, \\ \hat{h}_0^2 - \hat{\boldsymbol{h}}^2 = c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 + E_0^2. \end{cases} \tag{6.2.1.2}$$

若 $\hat{\boldsymbol{h}}=0$，则其下式无解. 若 $\hat{h}_0=0$，则

$$\hat{\boldsymbol{h}}^2 = - c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - E_0^2. \tag{6.2.1.3}$$

如果 $E_0\neq0$，则仍然无解，所以只有 $E_0=0$ 的粒子才可能有解. 解有很多，我们先取一个

$$\hat{H} = \hat{\boldsymbol{h}} = \mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}). \tag{6.2.1.4}$$

得到了一级四元数型的波动方程，即中微子的波动方程

$$[\hat{E} - \mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})]\psi = 0. \tag{6.2.1.5}$$

一级四元数型的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = F(\boldsymbol{r},t)u_1 + G(\boldsymbol{r},t)v_1. \tag{6.2.1.6}$$

二、方程的变换性质

中微子波动方程的变换性质有两类，一类是协变的，变换后方程的形式不变；另一类是互变的，变换后成为其反粒子的方程.

1. 协变性的变换

(1) 惯性系变换：

把(6.2.1.5)式写成

$$M(\hat{E} - \hat{H})\Lambda^{-1}\Lambda\psi = 0. \tag{6.2.1.7}$$

其中 M 和 Λ 是两个有逆的四元常数. 对于沿着空间 x,y,z 方向以速度 $c\beta$ 运动的

惯性系变换，其变换四元数为

$$\begin{cases}\Lambda_x = a - \mathrm{i}b\boldsymbol{k} = M_x^{-1},\\ \Lambda_y = a - \mathrm{i}b\boldsymbol{j} = M_y^{-1},\\ \Lambda_z = a - \mathrm{i}b\boldsymbol{i} = M_z^{-1}.\end{cases} \tag{6.2.1.8}$$

其中，$a=\sqrt{\dfrac{\gamma+1}{2}}$，$b=\sqrt{\dfrac{\gamma-1}{2}}$和 $\gamma=\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. 有 $a^2+b^2=\gamma, a^2-b^2=1, 2ab=\beta\gamma$.

任取(6.2.1.8)式中的第一式作验证.

$$\begin{aligned}M(\hat{E}-\hat{H})\Lambda^{-1} &= (a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})[\hat{E}-\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})](a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})\\ &= (a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})[a\hat{E}-bc\hat{p}_x-\mathrm{i}c(a\hat{p}_z+\mathrm{i}b\hat{p}_y)\boldsymbol{i}-\mathrm{i}c(a\hat{p}_y-\mathrm{i}b\hat{p}_z)\boldsymbol{j}\\ &\quad +(-\mathrm{i}ac\hat{p}_x+\mathrm{i}b\hat{E})\boldsymbol{k}]\\ &= a(a\hat{E}-bc\hat{p}_x)-\mathrm{i}b(-\mathrm{i}ac\hat{p}_x+\mathrm{i}b\hat{E})-\mathrm{i}c[a(a\hat{p}_z+\mathrm{i}b\hat{p}_y)\\ &\quad -\mathrm{i}b(a\hat{p}_y-\mathrm{i}b\hat{p}_z)]\boldsymbol{i}-\mathrm{i}c[a(a\hat{p}_y-\mathrm{i}b\hat{p}_z)+\mathrm{i}b(a\hat{p}_z+\mathrm{i}b\hat{p}_y)]\boldsymbol{j}\\ &\quad +[a(-\mathrm{i}ac\hat{p}_x+\mathrm{i}b\hat{E})+\mathrm{i}b(a\hat{E}-bc\hat{p}_x)]\boldsymbol{k}\\ &= \gamma\hat{E}-\beta\gamma c\hat{p}_x-\mathrm{i}c\left[\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\left(\gamma\hat{p}_x-\frac{\beta\gamma}{c}\hat{E}\right)\boldsymbol{k}\right]\\ &= \hat{E}'-\mathrm{i}c(\hat{p}_z'\boldsymbol{i}+\hat{p}_y'\boldsymbol{j}+\hat{p}_x'\boldsymbol{k}).\end{aligned}$$

类似地，(6.2.1.8)式中的另两个也可以验证.

(2) 绕空间轴的旋转变换：

对于绕着空间轴 x,y,z 旋转 φ 角的坐标系变换，变换四元数为

$$\begin{cases}\Lambda_x = M_x = \cos\dfrac{\varphi}{2}+\sin\dfrac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{k},\\ \Lambda_y = M_y = \cos\dfrac{\varphi}{2}+\sin\dfrac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{j},\\ \Lambda_z = M_z = \cos\dfrac{\varphi}{2}+\sin\dfrac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}.\end{cases} \tag{6.2.1.9}$$

任取上式中的第三个式子进行验证

$$\begin{aligned}&M_z(\hat{E}-\hat{H})\Lambda_z^{-1}\\ &= \left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right)[\hat{E}-\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})]\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right)\\ &= \left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right)\left[\cos\frac{\varphi}{2}\hat{E}-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z+\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z-\sin\frac{\varphi}{2}\hat{E}\right)\boldsymbol{i}\right.\\ &\quad \left.+\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y+\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x\right)\boldsymbol{j}+\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y\right)\boldsymbol{k}\right]\\ &= \cos\frac{\varphi}{2}\left(\cos\frac{\varphi}{2}\hat{E}-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z\right)-\sin\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z-\sin\frac{\varphi}{2}\hat{E}\right)\end{aligned}$$

$$+\left[\cos\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z-\sin\frac{\varphi}{2}\hat{E}\right)+\sin\frac{\varphi}{2}\left(\cos\frac{\varphi}{2}\hat{E}-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_z\right)\right]\boldsymbol{i}$$

$$+\left[\cos\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y+\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x\right)-\sin\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y\right)\right]\boldsymbol{j}$$

$$+\left[\cos\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y\right)+\sin\frac{\varphi}{2}\left(-\mathrm{i}\cos\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_y+\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}c\hat{p}_x\right)\right]\boldsymbol{k}$$

$$=\hat{E}-\mathrm{i}c\hat{p}_z\boldsymbol{i}-\mathrm{i}c(\cos\varphi\hat{p}_y-\sin\varphi\hat{p}_x)\boldsymbol{j}-\mathrm{i}c(\cos\varphi\hat{p}_x+\sin\varphi\hat{p}_y)\boldsymbol{k}.$$

其他两个变换四元数的正确性可类似地得到验证.

(3) 时空反演变换:

当时间和空间同时反演时,变换四元数为

$$\Lambda=M^{-1}=\mathrm{i}.$$

显然有

$$-\mathrm{i}(\hat{E}-\hat{H})(-\mathrm{i})=-(\hat{E}-\hat{H}).$$

(4) 等价方程:

对于有逆的变换四元常数 Λ,如果 $\Lambda^{-1}=\Lambda^{\dagger}$,那么变换后的方程与原方程等价. 例如绕空间轴的变换(6.2.1.9),变换后的方程与原方程等价,它不过是换一个坐标系而已. 再如

$$\Lambda=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{i}-\boldsymbol{k})=\Lambda^{-1}=\Lambda^{\dagger}.$$

有

$$\Lambda[\hat{E}-\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})]\Lambda^{-1}=\hat{E}+\mathrm{i}c(\hat{p}_x\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_z\boldsymbol{k}).$$

显然 $\hat{H}'=-\mathrm{i}c(\hat{p}_x\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_z\boldsymbol{k})$ 也是(6.2.1.3)式的一个解,方程 $(\hat{E}-\hat{H}')\psi'=0$ 与方程 $(\hat{E}-\hat{H})\psi=0$ 是等价的. 可以证明,(6.2.1.3)式只有一对解互不相似,恰好建立一对正、反中微子的方程,其他的解则都与这对解相似.

2. 正反粒子方程互变的变换

(1) 正反变换:

将方程(6.2.1.5)作正反变换后为其反方程

$$(\hat{E}-\hat{H})^{c}\psi^{c}=0. \tag{6.2.1.10a}$$

上式是反粒子的波动方程. 其中

$$\begin{cases}(\hat{E}-\hat{H})^{c}=-(\hat{E}+\hat{H}),\\ \psi^{c}=\left[F^{*}\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\boldsymbol{i})-G^{*}\frac{1}{2}(\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\boldsymbol{k})\right]v_1=-G^{*}u_1+F^{*}v_1.\end{cases}$$

与狄拉克方程不相类似之处在于正、反方程的形式是不同的.

(2) 宇称变换:

方程(6.2.1.5)作宇称变换后为

$$(\hat{E}+\hat{H})\psi(-\boldsymbol{r},t)=0.$$

也变成了原方程的反方程.

(3) 时间反演:

方程(6.2.1.5)进行时间反演后为

$$-(\hat{E}+\hat{H})\psi(\boldsymbol{r},-t)=0.$$

仍变成了原方程的反方程.

三、中微子的算符

粒子各种算符的形式是与他们波动方程的形式相关的.相应于波动方程(6.2.1.5),中微子的各种算符为

1. 哈密顿算符

中微子的哈密顿算符为

$$\hat{H}=\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k}).$$

于是其相对论性质量算符为

$$\hat{m}=\frac{\hat{H}}{c^2}=\frac{\mathrm{i}}{c}(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k}). \tag{6.2.1.11}$$

2. 速度算符

用波函数的厄米共轭 $\psi^\dagger$ 左乘方程(6.2.1.5),用波函数 ψ 右乘方程(6.2.1.5)的厄米共轭,然后两式相减得

$$\psi^\dagger(\hat{E}-\hat{H})\psi-[(\hat{E}-\hat{H})\psi]^\dagger\psi=0.$$

将它展开后为

$$\hat{E}(\psi^\dagger\psi)-\hat{p}_x(\psi^\dagger\mathrm{i}c\boldsymbol{k}\psi)-\hat{p}_y(\psi^\dagger\mathrm{i}c\boldsymbol{j}\psi)-\hat{p}_z(\psi^\dagger\mathrm{i}c\boldsymbol{i}\psi)=0.$$

得到了概率流的连续性方程.所以中微子的速度(即概率流密度)算符为

$$\begin{cases}\hat{v}_x=\mathrm{i}c\boldsymbol{k},\\ \hat{v}_y=\mathrm{i}c\boldsymbol{j},\\ \hat{v}_z=\mathrm{i}c\boldsymbol{i}.\end{cases} \tag{6.2.1.12}$$

容易验证有等式

$$\frac{1}{2}(\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}}+\hat{\boldsymbol{v}}\hat{m})=\hat{\boldsymbol{p}}.$$

3. 角动量算符

当坐标系绕空间轴 $\boldsymbol{e}$ 旋转 φ 角时,状态发生变换的四元数为 $\Lambda(\varphi)$,角动量在 $\boldsymbol{e}$ 方向投影的算符为

$$\hat{J}_e = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Lambda(\varphi)}{\partial\varphi}\bigg|_{\varphi=0}.$$

所以角动量算符为

$$\begin{cases} \hat{J}_x = \hat{L}_x - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{k}, \\ \hat{J}_y = \hat{L}_y - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{z}\boldsymbol{j}, \\ \hat{J}_z = \hat{L}_z - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}. \end{cases} \tag{6.2.1.13}$$

其中

$$\begin{cases} \hat{S}_x = -\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{k}, \\ \hat{S}_y = -\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{j}, \\ \hat{S}_z = -\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i} \end{cases} \tag{6.2.1.14}$$

是自旋算符.等式

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \frac{1}{4}(\boldsymbol{r}\times\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}} - \hat{m}\hat{\boldsymbol{v}}\times\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{v}}\hat{m} - \hat{\boldsymbol{v}}\times\boldsymbol{r}\hat{m})$$

表明了 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 是相对论性的轨道角动量,$\hat{\boldsymbol{S}}$ 是轨道角动量的相对论效应.

角动量平方的算符则为

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \\ &= \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \mathrm{i}\hbar(\hat{L}_z\boldsymbol{i} + \hat{L}_y\boldsymbol{j} + \hat{L}_x\boldsymbol{k}). \end{aligned} \tag{6.2.1.15}$$

4. 螺旋度算符

自旋在动量方向的分量称作螺旋度.其算符为

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2p}(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}) = -\frac{\hbar}{2cp}\hat{H}. \tag{6.2.1.16}$$

对于中微子的能量和动量同时确定的状态,因 $E=cp$,故中微子的螺旋度为 $-\dfrac{\hbar}{2}$.既表明了中微子自旋量子数为$\dfrac{1}{2}$,也表明了中微子是左旋性的.

四、反中微子方程

反中微子的波动方程若表示成

$$(\hat{E} - \hat{H}')\psi' = 0. \tag{6.2.1.10b}$$

则有

$$\begin{cases} \hat{H}' = -\hat{H}, \\ \hat{m}' = -\hat{m}, \\ \hat{\boldsymbol{v}}' = -\boldsymbol{v}, \\ \hat{\boldsymbol{S}}' \cdot \dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p} = \dfrac{\hbar}{2cp}\hat{H}'. \end{cases}$$

其他如角动量算符、自旋算符、角动量平方算符等与中微子相同.

正、反中微子的方程(6.2.1.5)和(6.2.1.10a)描述的是一对静质量为0、自旋为$\frac{1}{2}$的粒子. 其中,(6.2.1.5)式描述了中微子,螺旋度为$-\frac{1}{2}$,是左旋性的;(6.2.1.10a)式描述了反中微子,螺旋度为$\frac{1}{2}$,是右旋性的. 一对方程既无正反变换不变性,又无宇称变换不变性,正好反映了实践中只存在左旋的中微子和右旋的反中微子,因而弱作用下宇称不守恒的规律. 有些量子理论的书籍中用静质能$E_0=0$的狄拉克方程来描述中微子,因狄拉克方程具有正反变换和宇称变换的不变性,与弱作用下宇称不守恒的规律相悖,所以是不正确的.

另外,有个别实验室曾经报道过发现了中微子的静质量不为0! 果真如此的话,中微子将满足怎样的波动方程呢? 自旋为$\frac{1}{2}$,弱作用下宇称不守恒的规律,以及静质量不为0这些性质将如何统一在这个波动方程中需要解决的一个问题. 从本节的分析来看,宣称发现了中微子的静质量不为零似乎是过早了.

6.2.2 方程的解

中微子的波动方程

$$(\hat{E} - \hat{H})\psi = 0. \tag{6.2.2.1}$$

其中

$$\begin{cases} \hat{H} = \mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}), \\ \psi(\boldsymbol{r},t) = F(\boldsymbol{r},t)u_1 + G(\boldsymbol{r},t)v_1. \end{cases} \tag{6.2.2.2}$$

一、平面波

当动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 同时确定时,为平面波.

$$\begin{cases} F(\boldsymbol{r},t) = f\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}, \\ G(\boldsymbol{r},t) = g\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}. \end{cases} \tag{6.2.2.3}$$

把它代入方程(6.2.2.1)并展开为

$$\begin{cases}(E+cp_z)f+c(p_x-\mathrm{i}p_y)g=0,\\(E-cp_z)g+c(p_x+\mathrm{i}p_y)f=0.\end{cases}$$

f 和 g 有非0解的条件是

$$E^2=c^2(p_x^2+p_y^2+p_z^2)=c^2p^2.$$

得能量的本征值

$$E=\pm cp. \tag{6.2.2.4}$$

以及 f 和 g 之间的关系式

$$g=-\frac{c(p_x+\mathrm{i}p_y)}{E-cp_z}f. \tag{6.2.2.5}$$

正能态的平面波为

$$\begin{cases}\psi(\boldsymbol{r},t)=f\left(u_1-\dfrac{(p_x+\mathrm{i}p_y)}{p-p_z}v_1\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_+t)},\\E=E_+=cp.\end{cases} \tag{6.2.2.6}$$

由(4.1.12)式知其螺旋度为 $-\dfrac{\hbar}{2}$，表明粒子是左旋性的，是中微子.

负能态的平面波为

$$\begin{cases}\psi(\boldsymbol{r},t)=f\left(u_1+\dfrac{p_x+\mathrm{i}p_y}{p+p_z}v_1\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}+E_+t)},\\E=-E_+=-cp.\end{cases}$$

其螺旋度为 $\dfrac{\hbar}{2}$，是右旋性的. 与狄拉克方程类似可以证明，粒子的负能态就是其反粒子的正能态，因此后文中只讨论正能态.

二、圆柱面波

动量和角动量的 z 向分量 p_z，J_z 与能量 E 同时确定的状态是圆柱面波. 算符 $\hat{p}_z$ 与 $\hat{H}$ 对易，与 $\hat{J}_z$ 对易是明显的，我们验证 $\hat{J}_z$ 与 $\hat{H}$ 的对易性.

$$\begin{aligned}\hat{J}_z\hat{H}&=\left(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\\&=\mathrm{i}c\left[(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x)(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(-\hat{p}_z+\hat{p}_y\boldsymbol{k}-\hat{p}_x\boldsymbol{j})\right],\\\hat{H}\hat{J}_z&=\mathrm{i}c(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\left(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)\\&=\mathrm{i}c\Big[(x\hat{p}_y-y\hat{p}_x)(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\\&\quad+\left(\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x\boldsymbol{j}-\mathrm{i}\hbar\hat{p}_y\boldsymbol{k}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\hat{p}_z+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\hat{p}_y\boldsymbol{k}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\hat{p}_x\boldsymbol{j}\right)\Big].\end{aligned}$$

所以

$$\hat{J}_z \hat{H} = \hat{H} \hat{J}_z.$$

表明 p_z, J_z 和 E 能同时确定.

定义圆柱坐标系(ρ,φ,z),则 z 向动量 $p_z = \hbar k_z$ 和能量 $E=\hbar\omega$ 同时确定,使得状态函数中有因子 $e^{i(k_z z-\omega t)}$,于是

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = [f(\rho,\varphi)u_1 + g(\rho,\varphi)v_1]e^{i(k_z z-\omega t)}. \tag{6.2.2.7}$$

z 向角动量的本征方程为

$$\hat{J}_z(fu_1 + gv_1) = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{i\hbar}{2}\boldsymbol{i}\right)(fu_1 + gv_1) = m\hbar(fu_1 + gv_1).$$

展开后为

$$\begin{cases}\left(-i\dfrac{\partial}{\partial\varphi} + \dfrac{1}{2}\right)f = mf, \\ \left(-i\dfrac{\partial}{\partial\varphi} - \dfrac{1}{2}\right)g = mg.\end{cases}$$

于是状态为

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = [f(\rho)e^{i\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}u_1 + g(\rho)e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}v_1]e^{i(k_z z-\omega t)}. \tag{6.2.2.8}$$

把它代入波动方程

$$\left(\frac{\omega}{c} - ik_z\boldsymbol{i} - \frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{j} - \frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{k}\right)[f(\rho)e^{i\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi} + g(\rho)e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}] = 0.$$

展开后成为

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\omega}{c} + k_z\right)f(\rho)e^{i\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi} - i\left(\dfrac{\partial}{\partial x} - i\dfrac{\partial}{\partial y}\right)g(\rho)e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi} = 0, \\ \left(\dfrac{\omega}{c} - k_z\right)g(\rho)e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi} - i\left(\dfrac{\partial}{\partial x} + i\dfrac{\partial}{\partial y}\right)f(\rho)e^{i\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi} = 0.\end{cases}$$

由于

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x} - i\dfrac{\partial}{\partial y} = e^{-i\varphi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\rho} - \dfrac{i}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right), \\ \dfrac{\partial}{\partial x} + i\dfrac{\partial}{\partial y} = e^{i\varphi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\rho} + \dfrac{i}{\rho}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right).\end{cases}$$

故

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\omega}{c} + k_z\right)f(\rho) - i\left[\dfrac{dg(\rho)}{d\rho} + \left(m + \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{g(\rho)}{\rho}\right] = 0, \\ \left(\dfrac{\omega}{c} - k_z\right)g(\rho) - i\left[\dfrac{df(\rho)}{d\rho} - \left(m - \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{f(\rho)}{\rho}\right] = 0.\end{cases}$$

对 ρ 再求导一次,可得到

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{df}{d\rho} + \left[\frac{\omega^2}{c^2} - k_z^2 - \frac{\left(m - \frac{1}{2}\right)^2}{\rho^2}\right]f = 0.$$

这是连带贝塞尔方程，其解是普遍的 $m-\frac{1}{2}$ 阶柱函数

$$f(\rho)=Z_{m-\frac{1}{2}}(k_\rho\rho). \tag{6.2.2.9}$$

其中，$k_\rho^2=k^2-k_z^2=\frac{\omega^2}{c^2}-k_z^2$，$k=\frac{\omega}{c}$. 而

$$g(\rho)=\mathrm{i}\frac{k_\rho}{k-k_z}\left[Z'_{m-\frac{1}{2}}-\left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{Z_{m-\frac{1}{2}}}{k_\rho\rho}\right], \tag{6.2.2.10}$$

其中 $Z'_{m-\frac{1}{2}}$ 表示 $Z_{m-\frac{1}{2}}$ 对其宗量 $k_\rho\rho$ 的一阶导数. 于是柱面波为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\left\{Z_{m-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}u_1+\mathrm{i}\frac{k_\rho}{k-k_z}\left[Z'_{m-\frac{1}{2}}-\left(m-\frac{1}{2}\right)\frac{Z_{m-\frac{1}{2}}}{k_\rho\rho}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\right\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_zz+m\varphi-\omega t)}. \tag{6.2.2.11}$$

三、球面波

当角动量的 z 向分量、角动量平方和能量同时确定时为球面波.

用球坐标系 (r,θ,φ)、角动量的 z 向分量 $J_z=m\hbar$ 与能量 $E=\hbar\omega=\hbar ck$ 同时确定时，使状态函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\left[f(r,\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}u_1+g(r,\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}v_1\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}. \tag{6.2.2.12}$$

角动量平方 $\hat{J}^2$ 的本征方程

$$\hat{J}^2\psi=\left[\hat{L}^2+\frac{3}{4}\hbar^2-\mathrm{i}\hbar(\hat{L}_z\boldsymbol{i}+\hat{L}_y\boldsymbol{j}+\hat{L}_x\boldsymbol{k})\right]\psi=\left(K-\frac{1}{2}\right)\left(K+\frac{1}{2}\right)\hbar^2\psi. \tag{6.2.2.13}$$

它展开后为

$$\begin{cases}\left(\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}-K^2+1+\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\right)f\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}+\frac{1}{\hbar}(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)g\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}=0,\\ \left(\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}-K^2+1-\frac{\hat{L}_z}{\hbar}\right)g\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi}+\frac{1}{\hbar}(\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y)f\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi}=0.\end{cases}$$

在球坐标系中

$$\begin{cases}\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}=-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2},\\ \frac{1}{\hbar}(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \frac{1}{\hbar}(\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \frac{1}{\hbar}\hat{L}_z=-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.\end{cases}$$

因而

$$\begin{cases}\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+K^2-1-\dfrac{\left(m-\dfrac{1}{2}\right)^2}{\sin^2\theta}-\left(m-\dfrac{1}{2}\right)\right]f\\ \quad+\dfrac{\partial g}{\partial\theta}+\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}g=0,\\ \left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+K^2-1-\dfrac{\left(m+\dfrac{1}{2}\right)^2}{\sin^2\theta}+\left(m+\dfrac{1}{2}\right)\right]g\\ \quad-\dfrac{\partial f}{\partial\theta}+\left(m-\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}f=0.\end{cases}\tag{6.2.2.14}$$

上式有两组解

$$\begin{cases}f_1(r,\theta)=\left(|K|-m+\dfrac{1}{2}\right)R_1(r)\mathrm{P}_{|K|}^{m-\frac{1}{2}}(\cos\theta),\\ g_1(r,\theta)=R_1(r)\mathrm{P}_{|K|}^{m+\frac{1}{2}}(\cos\theta);\end{cases}\tag{6.2.2.15a}$$

和

$$\begin{cases}f_2(r,\theta)=-\left(|K|+m-\dfrac{1}{2}\right)R_2(r)\mathrm{P}_{|K|-1}^{m-\frac{1}{2}}(\cos\theta),\\ g_2(r,\theta)=R_2(r)\mathrm{P}_{|K|-1}^{m+\frac{1}{2}}(\cos\theta).\end{cases}\tag{6.2.2.15b}$$

由于

$$\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial z}=\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta},\\ \dfrac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}+\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\ \dfrac{\partial}{\partial x}-\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}-\dfrac{\mathrm{i}}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right).\end{cases}$$

把态函数(6.2.2.12)代入波动方程并展开成

$$\begin{cases}\left(\mathrm{i}k+\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)f+\left[\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\dfrac{\partial}{r\partial\theta}+\dfrac{m+\dfrac{1}{2}}{r\sin\theta}\right]g=0,\\ \left(\mathrm{i}k-\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\sin\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}\right)g+\left[\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial r}+\cos\theta\dfrac{\partial}{r\partial\theta}-\dfrac{m-\dfrac{1}{2}}{r\sin\theta}\right]f=0.\end{cases}\tag{6.2.2.16}$$

把(6.2.2.15)式的两组解叠加起来代入上式得到

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}R_1}{\mathrm{d}r}+(|K|+1)\dfrac{R_1}{r}-\mathrm{i}kR_2=0,\\ \dfrac{\mathrm{d}R_2}{\mathrm{d}r}-(|K|-1)\dfrac{R_2}{r}-\mathrm{i}kR_1=0.\end{cases}\tag{6.2.2.17}$$

两个径向函数所满足的方程，用级数法解他们. 令

$$\begin{cases}R_1(r)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\sum\limits_{n=0}^{\infty}a_n(\mathrm{i}kr)^{n+s},\\ R_2(r)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\sum\limits_{n=0}^{\infty}b_n(\mathrm{i}kr)^{n+s}.\end{cases}\tag{6.2.2.18}$$

代入(6.2.2.17)式得到

$$\begin{cases}\sum\limits_{n=0}^{\infty}(n+s+|K|+1)a_n(\mathrm{i}kr)^{n+s-1}+\sum\limits_{n=0}^{\infty}(a_n-b_n)(\mathrm{i}kr)^{n+s}=0,\\ \sum\limits_{n=0}^{\infty}(n+s-|K|+1)b_n(\mathrm{i}kr)^{n+s-1}-\sum\limits_{n=0}^{\infty}(a_n-b_n)(\mathrm{i}kr)^{n+s}=0.\end{cases}$$

由$(\mathrm{i}kr)^{s-1}$项知

$$\begin{cases}b_0=0,\quad 当\ s=-|K|-1\ 时,\\ a_0=0,\quad 当\ s=|K|-1\ 时.\end{cases}$$

因为当$r\to\infty$时态函数应有界，所以$a_0=0$，$s=|K|-1$的情况应删去. 这样得系数的递推公式

$$\begin{cases}a_{n+1}=-\dfrac{a_n-b_n}{n+1},\\ b_{n+1}=-\dfrac{a_n-b_n}{2|K|-n-1},\\ b_0=0.\end{cases}$$

上式可以归结为

$$\begin{cases}a_n=(-1)^n\dfrac{2^{n-1}(|K|-1)!(2|K|-n)!}{n!(|K|-n)!(2|K|-1)!}a_0,\\ b_n=(-1)^n\dfrac{2^{n-1}(|K|-1)!(2|K|-n-1)!}{(n-1)!(|K|-n)!(2|K|-1)!}a_0,\\ n=1,2,3,\cdots,|K|,\quad K=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots.\end{cases}\tag{6.2.2.19}$$

态函数(6.2.2.12)、(6.2.2.15)中两式之和、(6.2.2.18)式以及(6.2.2.19)式表示了中微子的球面波，在球面波中，$r\to0$有奇异性，这是因为该处应该存在着产生中微子的源，所以是合理的.

§ 6.3　静质量为 0 的矢量波动方程

6.3.1　方程和波函数条件

一、方程的建立

在二级四元数领域，狄拉克把克莱因-戈尔登方程分解，取

$$\hat{H}_D = -\mathrm{i}E_0\boldsymbol{i}_2 - c(\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2. \tag{6.3.1.1}$$

建立了著名的狄拉克方程，我们已在 § 5.3 中作了较为详细的讨论. 不过还遗留了一个问题尚待解决，那就是还存不存在其他的分解方式，建立与狄拉克方程并不等价的方程？在静质能 $E_0\neq 0$ 的情形下，这个问题尚未获得解决，但是在静质能 $E_0=0$ 的情形下，却存在着另外的分解结果，使得所建立的方程与 $E_0=0$ 的狄拉克方程并不等价，比如说取

$$\hat{H}_0 = \mathrm{i}c(\hat{p}_x\boldsymbol{i}_2 + \hat{p}_y\boldsymbol{j}_2 + \hat{p}_z\boldsymbol{k}_2). \tag{6.3.1.2}$$

显然 $\hat{H}_0^2=c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2$，所以可以建立起一对波动方程

$$\begin{cases}(\hat{E}-\hat{H}_0)\psi_+ = 0, & (6.3.1.3\text{a})\\ (\hat{E}+\hat{H}_0)\psi_- = 0. & (6.3.1.3\text{b})\end{cases}$$

先证明上式与 $E_0=0$ 的狄拉克方程并不等价.

若存在着一个二级四元常数 A，使得

$$\hat{H}_0A = A\hat{H}_D\,|_{E_0=0}.$$

那么它的形式必定为

$$\begin{aligned}A =& a + \mathrm{i}a\boldsymbol{i} - \mathrm{i}b\boldsymbol{j} - b\boldsymbol{k} + (b - \mathrm{i}b\boldsymbol{i} - \mathrm{i}a\boldsymbol{j} + a\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_2\\ &+ (\mathrm{i}b + b\boldsymbol{i} + a\boldsymbol{j} + \mathrm{i}a\boldsymbol{k})\boldsymbol{j}_2 + (-\mathrm{i}a + a\boldsymbol{i} - b\boldsymbol{j} + \mathrm{i}b\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}_2.\end{aligned} \tag{6.3.1.4}$$

其中 a 和 b 是任意两个复常数.

由于二级四元常数 A 的模方 $\|A\|=0$，因此 A 不存在逆，从而 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_D|_{E_0=0}$ 并不相似，所以方程(6.3.1.3a)与 $E_0=0$ 的狄拉克方程并不等价. 因为 $-\hat{H}_D$ 与 $\hat{H}_D$ 相似，所以 $-\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_D|_{E_0=0}$ 也不相似. 而且易证 $-\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_0$ 也不相似，所以在 $E_0=0$ 的情形下可以建立起一对与狄拉克方程并不等价的波动方程(6.3.1.3)，用来描述一对静质量为 0 的微观粒子.

二、方程的变换性质

1. 变换不变性

只讨论方程(6.3.1.3a),并略去角标“+”. 把算符和波函数的变换写成

$$\begin{cases} \hat{E}' - \hat{H}_0' = M_0(\hat{E} - \hat{H}_0)\Lambda_0^{-1}, \\ \psi' = \Lambda_0\psi. \end{cases} \tag{6.3.1.5}$$

(1) 沿着空间坐标轴 x, y, z 以速度 $c\beta$ 运动的惯性系变换,变换四元数分别为

$$\begin{cases} M_0(x) = \Lambda_0^{-1}(x) = a + \mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2, \\ M_0(y) = \Lambda_0^{-1}(y) = a + \mathrm{i}b\boldsymbol{j}_2, \\ M_0(z) = \Lambda_0^{-1}(z) = a + \mathrm{i}b\boldsymbol{k}_2. \end{cases} \tag{6.3.1.6}$$

其中,$a=\sqrt{\frac{\gamma+1}{2}}, b=\sqrt{\frac{\gamma-1}{2}}, \gamma=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. 有 $a^2+b^2=\gamma, a^2-b^2=1, 2ab=\gamma\beta$.

(2) 绕着空间坐标轴 x, y, z 旋转 φ 角的空间坐标系变换,变换四元数分别为

$$\begin{cases} M_0(x) = \Lambda_0(x) = \cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{i}_2, \\ M_0(y) = \Lambda_0(y) = \cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{j}_2, \\ M_0(z) = \Lambda_0(z) = \cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{k}_2. \end{cases} \tag{6.3.1.7}$$

变换四元数(6.3.1.6)和(6.3.1.7)式的正确性都可由验算来证明,这里我们任取其一进行验算.

$$\begin{aligned} \hat{E}' - \hat{H}_0' &= M_0(x)(\hat{E} - \hat{H}_0)\Lambda_0^{-1}(x) \\ &= (a + \mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2)(\hat{E} - \mathrm{i}c\hat{p}_x\boldsymbol{i}_2 - \mathrm{i}c\hat{p}_y\boldsymbol{j}_2 - \mathrm{i}c\hat{p}_z\boldsymbol{k}_2)(a + \mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2) \\ &= (a + \mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2)[(a\hat{E} - bc\hat{p}_x) - (a\mathrm{i}c\hat{p}_x - \mathrm{i}b\hat{E})\boldsymbol{i}_2 \\ &\quad - (a\mathrm{i}c\hat{p}_y - bc\hat{p}_z)\boldsymbol{j}_2 - (a\mathrm{i}c\hat{p}_z + bc\hat{p}_y)\boldsymbol{k}_2] \\ &= (a^2 + b^2)\hat{E} - 2abc\hat{p}_x + [2ab\mathrm{i}\hat{E} - (a^2 + b^2)\mathrm{i}c\hat{p}_x]\boldsymbol{i}_2 \\ &\quad - (a^2 - b^2)\mathrm{i}c\hat{p}_y\boldsymbol{j}_2 - (a^2 - b^2)\mathrm{i}c\hat{p}_z\boldsymbol{k}_2 \\ &= \gamma\hat{E} - \gamma\beta c\hat{p}_x - \mathrm{i}c\left(\gamma\hat{p}_x - \gamma\frac{\beta}{c}\hat{E}\right)\boldsymbol{i}_2 - \mathrm{i}c\hat{p}_y\boldsymbol{j}_2 - \mathrm{i}c\hat{p}_z\boldsymbol{k}_2. \end{aligned}$$

证毕.

(3)时空同时反演,方程变成

$$-(\hat{E} - \hat{H}_0)\psi(-\boldsymbol{r}, -t) = 0.$$

与原方程相同.

2. 方程(6.3.1.3a)与(6.3.1.3b)互变

(1) 正反变换

$$(\hat{E}-\hat{H}_0)^c\psi_+^c=0.$$

其中算符的正反变换

$$(\hat{E}-\hat{H}_0)^c=-\hat{E}-\hat{H}_0. \tag{6.3.1.8a}$$

波函数

$$\psi_+=\psi_1u_1u_2+\psi_2v_1u_2+\psi_3u_1v_2+\psi_4v_1v_2. \tag{6.3.1.8b}$$

正反变换后为

$$\psi_+^c=\psi_4^*u_1u_2-\psi_3^*v_1u_2-\psi_2^*u_1v_2+\psi_1^*v_1v_2.$$

所以方程(6.3.1.3a)和(6.3.1.3b)是一对正反方程.

(2) 宇称变换:

宇称变换使方程(6.3.1.3a)变成

$$(\hat{E}+\hat{H}_0)\psi_+(-\boldsymbol{r},t)=0. \tag{6.3.1.9}$$

(3) 时间反演:

时间反演使方程(6.3.1.3a)变成

$$(-\hat{E}-\hat{H}_0)\psi(\boldsymbol{r},-t)=0. \tag{6.3.1.10}$$

这就表明,$\psi(\boldsymbol{r},-t)$,$\psi(-\boldsymbol{r},t)$与$\psi^c(\boldsymbol{r},t)$除了可差一常相因子外是相同的.

三、波函数条件

求方程(6.3.1.3a)的平面波解(略去角标"+").

因$E_0=0$,在动量和能量同时确定时,

$$\begin{cases}\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k},\\ E=\hbar\omega\end{cases}$$

为平面波

$$\psi=[(\psi_1u_1+\psi_2v_1)u_2+(\psi_3u_1+\psi_4v_1)v_2]e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{6.3.1.11}$$

代入方程(6.3.1.3a)后展开得

$$\begin{cases}(E+cp_x)\psi_1+c(p_z-ip_y)\psi_3=0,\\ (E+cp_x)\psi_2+c(p_z-ip_y)\psi_4=0,\\ (E-cp_x)\psi_3+c(p_z+ip_y)\psi_1=0,\\ (E-cp_x)\psi_4+c(p_z+ip_y)\psi_2=0.\end{cases}$$

解得能量的本征值(只取正能态)

$$E=cp. \tag{6.3.1.12}$$

波函数四个元之间的关系为

$$\frac{\psi_3}{\psi_1}=\frac{\psi_4}{\psi_2}=-\frac{p_z+\mathrm{i}p_y}{p-p_x}. \tag{6.3.1.13}$$

(6.3.1.13)式表明,波函数四个元中还有两个元可独立地变化,一个归一化条件还不足以把他们完全确定,这就是说,单是方程(6.3.1.3a)还不能用来描述一个微观粒子,因而需要增加一个条件来约束两个元之间的关系,这个条件既要反映客观规律,又要与方程(6.3.1.3a)相容,即由方程(6.3.1.3a)与增加的波函数条件共同来描述微观粒子.

给波函数增加的条件是:波函数中第四个元与第一个元之比是纯虚数$-\mathrm{i}$,即

$$\frac{\psi_4(\boldsymbol{r},t)}{\psi_1(\boldsymbol{r},t)}=-\mathrm{i}. \tag{6.3.1.14}$$

这个条件在物理上的意义从下文的讨论中将逐步显现出来,现在先就增加了这个条件后对状态将产生的影响予以讨论.

波函数条件(6.3.1.14)式在惯性系变换和空间坐标系旋转变换中也应该是不变的.由

$$\psi'=\Lambda_0\psi.$$

对于惯性系变换,由(6.3.1.6)式知

$$\begin{cases}(a-\mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2)[(\psi_1u_1+\psi_2v_1)u_2+(\psi_3u_1+\psi_4v_1)v_2]\\ \quad=(a+b)(\psi_1u_1+\psi_2v_1)u_2+(a-b)(\psi_3u_1+\psi_4v_1)v_2,\\ (a-\mathrm{i}b\boldsymbol{j}_2)[(\psi_1u_1+\psi_2v_1)u_2+(\psi_3u_1+\psi_4v_1)v_2]\\ \quad=[(a\psi_1-\mathrm{i}b\psi_3)u_1+(a\psi_2-\mathrm{i}b\psi_4)v_1]u_2+[(a\psi_3+\mathrm{i}b\psi_1)u_1\\ \qquad+(a\psi_4+\mathrm{i}b\psi_2)v_1]v_2,\\ (a-\mathrm{i}b\boldsymbol{k}_2)[(\psi_1u_1+\psi_2v_1)u_2+(\psi_3u_1+\psi_4v_1)v_2]\\ \quad=[(a\psi_1+b\psi_3)u_1+(a\psi_2+b\psi_4)v_1]u_2+[(a\psi_3+b\psi_1)u_1+(a\psi_4+b\psi_2)v_1]v_2.\end{cases}$$

如果在原惯性系中满足$\psi_4=-\mathrm{i}\psi_1$,那么在新惯性系中$\frac{\psi_4'}{\psi_1'}$分别为

$$\frac{(a-b)\psi_4}{(a+b)\psi_1},\quad\frac{a\psi_4+\mathrm{i}b\psi_2}{a\psi_1-\mathrm{i}b\psi_3},\quad\frac{a\psi_4+b\psi_2}{a\psi_1+b\psi_3}.$$

他们并不满足条件(6.3.1.14)式.

对于坐标系的旋转变换(6.3.1.7)式,只要把式中的a换成$\cos\frac{\varphi}{2}$,b换成$-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}$,就得到了旋转后的坐标系中波函数第四个元与第一个元之比$\frac{\psi_4'}{\psi_1'}$,分别为

$$\frac{\psi_4\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}\right)}{\psi_1\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\sin\frac{\varphi}{2}\right)},\quad\frac{\psi_4\cos\frac{\varphi}{2}+\psi_2\sin\frac{\varphi}{2}}{\psi_1\cos\frac{\varphi}{2}-\psi_3\sin\frac{\varphi}{2}},\quad\frac{\psi_4\cos\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\psi_2\sin\frac{\varphi}{2}}{\psi_1\cos\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\psi_3\sin\frac{\varphi}{2}}.$$

它们也不满足条件(6.3.1.14)式.

为了使波函数条件满足爱因斯坦相对性原理,可以对变换四元数(6.3.1.6)和(6.3.1.7)式进行修改,这种修改既能保证波动方程的变换性质保持原样,又能让增加的波函数条件能符合爱因斯坦相对性原理.

考察波动方程(6.3.1.3),它是纯二级四元数型的,因此在其变换四元数(6.3.1.6)和(6.3.1.7)式中增加一个有逆的一级四元数型因子并不会影响方程中算符的变换性质,但对方程中波函数的变换性质却全然不同了.修改变换四元数的具体方法是:把(6.3.1.6)式的惯性系变换四元数修改成

$$\begin{cases}M_0(x)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{i})(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2), & \Lambda_0(x)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{i})(a-\mathrm{i}b\boldsymbol{i}_2),\\ M_0(y)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{j}_2), & \Lambda_0(y)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})(a-\mathrm{i}b\boldsymbol{j}_2),\\ M_0(z)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{j})(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k}_2), & \Lambda_0(z)=(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{j})(a-\mathrm{i}b\boldsymbol{k}_2).\end{cases}\tag{6.3.1.15}$$

把(6.3.1.7)式的坐标系旋转变换四元数修改成

$$\begin{cases}M_0(x)=\Lambda_0(x)=\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{i}_2\right),\\ M_0(y)=\Lambda_0(y)=\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{k}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{j}_2\right),\\ M_0(z)=\Lambda_0(z)=\left(\cos\frac{\varphi}{2}+\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{j}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2}-\sin\frac{\varphi}{2}\,\boldsymbol{k}_2\right).\end{cases}\tag{6.3.1.16}$$

在变换四元数(6.3.1.15)和(6.3.1.16)中各取其一来验证条件(6.3.1.14)的不变性.例如,取(6.3.1.15)式的中间一个 $\Lambda_0(y)$,则

$$\begin{aligned}&(a+\mathrm{i}b\boldsymbol{k})(a-\mathrm{i}b\boldsymbol{j}_2)[(\psi_1\boldsymbol{u}_1+\psi_2 v_1)\boldsymbol{u}_2+(\psi_3\boldsymbol{u}_1+\psi_4 v_1)v_2]\\ &=[a^2(\psi_1\boldsymbol{u}_1+\psi_2 v_1)-\mathrm{i}ab(\psi_3\boldsymbol{u}_1+\psi_4 v_1)]\boldsymbol{u}_2\\ &\quad+[-ab(\psi_1 v_1+\psi_2\boldsymbol{u}_1)+\mathrm{i}b^2(\psi_3 v_1+\psi_4\boldsymbol{u}_1)]\boldsymbol{u}_2\\ &\quad+[a^2(\psi_3\boldsymbol{u}_1+\psi_4 v_1)+\mathrm{i}ab(\psi_1\boldsymbol{u}_1+\psi_2 v_1)]v_2\\ &\quad+[-ab(\psi_3 v_1+\psi_4\boldsymbol{u}_1)-\mathrm{i}b^2(\psi_1 v_1+\psi_2\boldsymbol{u}_1)]v_2.\end{aligned}$$

在新的惯性系中,波函数第四个元与第一个元之比为

$$\frac{a^2\psi_4+\mathrm{i}ab\psi_2-ab\psi_3-\mathrm{i}b^2\psi_1}{a^2\psi_1-\mathrm{i}ab\psi_3-ab\psi_2+\mathrm{i}b^2\psi_4}=-\mathrm{i},\quad 当\ \frac{\psi_4}{\psi_1}=-\mathrm{i}\ 时.$$

取(5.3.1.16)式的下面一个 $\Lambda_0(z)$,算出的第四个元与第一个元之比为

$$\frac{\psi_4\cos^2\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\psi_2\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}-\psi_3\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}+\mathrm{i}\psi_1\sin^2\frac{\varphi}{2}}{\psi_1\cos^2\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\psi_3\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}+\psi_2\sin\frac{\varphi}{2}\cos\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\psi_4\sin^2\frac{\varphi}{2}}=-\mathrm{i},\quad 当\ \frac{\psi_4}{\psi_1}=-\mathrm{i}\ 时.$$

其他可类似地验证.

四、波函数条件的物理意义

(6.3.1.3)式的一对方程和波函数条件(6.3.1.14)式共同描述了一对静质量为0的正反微观粒子.方程中哈密顿算符的形式虽然比较简单,但求解时却不太方便.更由于对态函数所给的约束条件的物理意义还不清楚,因此对哈密顿算符作相似变换,应用其等价方程.

取有逆的二级四元常数

$$\begin{cases} Q = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 + \imath \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2), \\ Q^{-1} = Q^{\dagger} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 - \imath \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2). \end{cases} \tag{6.3.1.17}$$

将方程(6.3.1.3)作等价变换得

$$(\hat{E} \mp H)G_{\pm} = Q(E \mp H_0)Q^{-1}Q\psi_{\pm} = 0. \tag{6.3.1.18}$$

于是

$$\begin{cases} \hat{H} = QH_0Q^{-1} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 + \imath \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2)\imath c(p_x \boldsymbol{i}_2 + p_y \boldsymbol{j}_2 + p_z \boldsymbol{k}_2)\dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 - \imath \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2) \\ \quad = c(-p_z \boldsymbol{j}\boldsymbol{i}_2 + \imath p_y \boldsymbol{j}_2 + \hat{p}_x \boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2), \\ G_{\pm} = (G_{1\pm}u_1 + G_{2\pm}v_1)u_2 + (G_{3\pm}u_1 + G_{4\pm}v_1)v_2 \\ \quad = Q\psi_{\pm} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(1 + \imath \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2)[(\psi_{1\pm}u_1 + \psi_{2\pm}v_1)u_1 + (\psi_{3\pm}u_1 + \psi_{4\pm}v_1)v_2]. \end{cases} \tag{6.3.1.19}$$

得到

$$\begin{cases} G_{1\pm} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1\pm} + \imath\psi_{4\pm}) = \sqrt{2}\,\psi_{1\pm}, \\ G_{2\pm} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2\pm} - \imath\psi_{3\pm}), \\ G_{3\pm} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{3\pm} - \imath\psi_{2\pm}), \\ G_{4\pm} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{4\pm} + \imath\psi_{1\pm}) \equiv 0. \end{cases} \tag{6.3.1.20}$$

对于波动方程

$$(E \mp \hat{H})G_{\pm} = 0. \tag{6.3.1.21a}$$

波函数第四个元恒为0.

应用等价方程(6.3.1.21a)后,惯性系变换和坐标系旋转变换的变换四元数(6.3.1.15)和(6.3.1.16)要相应地发生变更.令

$$(E' \mp H')G'_{\pm} = M_{\pm}\,(E \mp H)\Lambda_{\pm}^{-1}\,\Lambda_{\pm}\,G_{\pm} = 0.$$

由于

$$
\begin{aligned}
(E' \mp H')G'_{\pm} &= Q(E' \mp H'_0)Q^{-1}Q\psi'_{\pm} \\
&= QM_{0\pm}(E \mp H_0)\Lambda_{0\pm}^{-1}Q^{-1}Q\Lambda_{0\pm}\psi_{\pm} \\
&= QM_{0\pm}Q^{-1}(E \mp H)Q\Lambda_{0\pm}^{-1}Q^{-1}Q\Lambda_{0\pm}Q^{-1}G_{\pm}.
\end{aligned}
$$

因此，有

$$
\begin{cases}
M_{\pm} = QM_{0\pm}Q^{-1}, \\
\Lambda_{\pm} = Q\Lambda_{0\pm}Q^{-1}.
\end{cases} \tag{6.3.1.22}
$$

于是波动方程(6.3.1.21)沿 x,y,z 的惯性系变换四元数分别为

$$
\begin{cases}
M_{\pm}(x) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) - (\gamma-1)\boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2 \pm \beta\gamma(\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}_2 + \boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)], \\
\Lambda_{\pm}(x) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) + (\gamma-1)\boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2 \pm \beta\gamma(\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)], \\
M_{\pm}(y) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) + \mathrm{i}(\gamma-1)\boldsymbol{i} \pm \beta\gamma(\mathrm{i} - \boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2], \\
\Lambda_{\pm}(y) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) - \mathrm{i}(\gamma-1)\boldsymbol{i} \mp \beta\gamma(\mathrm{i} + \boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2], \\
M_{\pm}(z) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) \pm \mathrm{i}\beta\gamma\boldsymbol{j} + \mathrm{i}(\gamma - 1 \pm \mathrm{i}\beta\gamma\boldsymbol{j})\boldsymbol{i}_2], \\
\Lambda_{\pm}(z) = \dfrac{1}{2}[(\gamma+1) \pm \mathrm{i}\beta\gamma\boldsymbol{j} - \mathrm{i}(\gamma - 1 \pm \mathrm{i}\beta\gamma\boldsymbol{j})\boldsymbol{i}_2].
\end{cases} \tag{6.3.1.23}
$$

绕空间轴 x,y,z 的旋转变换四元数分别为

$$
\begin{cases}
M_{\pm}(x) = \Lambda_{\pm}(x) = \dfrac{1}{2}[(1+\cos\varphi) - (1-\cos\varphi)\boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2 - \mathrm{i}\sin\varphi(\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)], \\
M_{\pm}(y) = \Lambda_{\pm}(y) = \dfrac{1}{2}[(1+\cos\varphi) + \mathrm{i}(1-\cos\varphi)\boldsymbol{i} - \sin\varphi(1 - \mathrm{i}\boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2], \\
M_{\pm}(z) = \Lambda_{\pm}(z) = \dfrac{1}{2}[(1+\cos\varphi) + \sin\varphi\boldsymbol{j} + \mathrm{i}(1 - \cos\varphi - \sin\varphi\boldsymbol{j})\boldsymbol{i}_2].
\end{cases} \tag{6.3.1.24}
$$

上述变换四元数(6.3.1.23)和(6.3.1.24)表明，波动方程(6.3.1.21)中的波函数 $G_{\pm}$ 所剩的三个元 $G_{1\pm}$，$G_{2\pm}$ 和 $G_{3\pm}$ 的变换性质与三维空间矢量的变换性质完全相同. 也即是说，波函数 $G_{\pm}$ 的前三个元是一个三维空间矢量，第四个元恒为 0，但是 $G_{\pm}$ 却并不是四矢量. 其中 G_{+} 是右手系的三维空间矢量，而 G_{-} 是左手系的三维空间矢量. 可以改用矢量来表示波函数 $G_{\pm}$

$$
\boldsymbol{g}_{\pm} = G_{\pm}.
$$

这样波动方程(6.3.1.21a)也就可改写成矢量形式

$$\begin{cases}\nabla\times\boldsymbol{g}_\pm\pm\dfrac{\partial\boldsymbol{g}_\pm}{\partial(\mathrm{i}ct)}=0,\\ \nabla\cdot\boldsymbol{g}_\pm=0.\end{cases}\tag{6.3.1.21b}$$

通过上述的讨论,使我们知道了一个三维空间的矢量也可能用来作为波函数描述微观粒子的状态,这在当今通行的量子力学中还未曾见过有这类叙述.

五、粒子的算符

由波动方程(6.3.1.21)描述的粒子,它的主要算符的形式是:

1. 质量算符

粒子的质量算符为

$$\hat{m}_\pm=\pm\frac{\hat{H}}{c^2}=\pm\frac{1}{c}(-\hat{p}_z\boldsymbol{j}\boldsymbol{i}_2+\mathrm{i}\hat{p}_y\boldsymbol{j}_2+\hat{p}_x\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2).\tag{6.3.1.25}$$

2. 速度算符

用波函数的厄米共轭左乘波动方程,用波函数右乘波动方程的厄米共轭,然后两式相减得

$$G_\pm^\dagger(\hat{E}\mp\hat{H})G_\pm-[(\hat{E}\mp\hat{H})G_\pm]^\dagger G_\pm=0.$$

将它展开后得到了概率流的连续性方程

$$\hat{E}(G_\pm^\dagger G_\pm)-\hat{p}_x[G_\pm^\dagger(\pm c\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2)G_\pm]-\hat{p}_y[G_\pm^\dagger(\pm\mathrm{i}c\boldsymbol{j}_2)G_\pm]-\hat{p}_z[G_\pm^\dagger(\mp c\boldsymbol{j}\boldsymbol{i}_2)G_\pm]=0.$$

于是知速度算符为

$$\begin{cases}\hat{v}_{x\pm}=\pm c\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2,\\ \hat{v}_{y\pm}=\pm\mathrm{i}c\boldsymbol{j}_2,\\ \hat{v}_{z\pm}=\mp c\boldsymbol{j}\boldsymbol{i}_2.\end{cases}\tag{6.3.1.26a}$$

也易验证有等式

$$\frac{1}{2}(\hat{m}_\pm\hat{\boldsymbol{v}}_\pm+\hat{\boldsymbol{v}}_\pm\hat{m}_\pm)=\hat{\boldsymbol{p}}.$$

速度(即概率流密度)的矢量形式为

$$\boldsymbol{v}_\pm=G_\pm^\dagger\hat{\boldsymbol{v}}_\pm G_\pm=\mp\mathrm{i}c\boldsymbol{g}^*\times\boldsymbol{g}.\tag{6.3.1.26b}$$

3. 角动量算符

由绕空间轴旋转的变换四元数(6.3.1.24)式,计算$-\mathrm{i}\hbar\left.\dfrac{\partial\Lambda}{\partial\varphi}\right|_{\varphi=0}$得自旋算符

$$\begin{cases}\hat{S}_{x\pm}=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{j}\boldsymbol{k}_2-\boldsymbol{k}\boldsymbol{j}_2),\\ \hat{S}_{y\pm}=\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2}(1-\mathrm{i}\boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2,\\ \hat{S}_{z\pm}=-\dfrac{\hbar}{2}(\mathrm{i}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{j}\boldsymbol{i}_2).\end{cases}\tag{6.3.1.27}$$

角动量算符为

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}.$$

其平方算符为

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2&=\hat{L}^2+\hat{S}^2+2\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}\\&=\hat{L}^2+\frac{\hbar^2}{2}[3-\mathrm{i}\boldsymbol{i}-(\mathrm{i}-\boldsymbol{i})\boldsymbol{i}_2]+\hbar[\hat{L}_x(\boldsymbol{jk}_2-\boldsymbol{kj}_2)\\&\quad+\hat{L}_y(\mathrm{i}+\boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2-\hat{L}_z(\mathrm{i}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{ji}_2)].\end{aligned}\tag{6.3.1.28}$$

角动量 z 向分量的算符为

$$\hat{J}_z=\hat{L}_z-\frac{\hbar}{2}(\mathrm{i}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{ji}_2).\tag{6.3.1.29}$$

本征方程

$$\begin{cases}\hat{J}_zG_\pm=m\hbar G_\pm,\\\hat{J}^2G_\pm=j(j+1)\hbar^2G_\pm.\end{cases}\tag{6.3.1.30a}$$

表示成矢量形式的方程则为

$$\begin{cases}\hat{L}_z\boldsymbol{g}_\pm+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{g}_\pm=m\hbar\boldsymbol{g}_\pm,\\(\hat{L}^2+2\hbar^2)\boldsymbol{g}_\pm+2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\times\boldsymbol{g}_\pm=j(j+1)\hbar^2\boldsymbol{g}_\pm.\end{cases}\tag{6.3.1.30b}$$

4. 螺旋度算符

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}=\frac{\hbar}{2p}[\hat{p}_x(\boldsymbol{jk}_2-\boldsymbol{kj}_2)+\hat{p}_y(\mathrm{i}+\boldsymbol{i})\boldsymbol{j}_2-\hat{p}_z(\mathrm{i}\boldsymbol{j}+\boldsymbol{ji}_2)].\tag{6.3.1.31}$$

其本征方程

$$\left(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}\right)G_\pm=s_p\hbar G_\pm\tag{6.3.1.32a}$$

的矢量形式为

$$\nabla\times\boldsymbol{g}_\pm=s_p\frac{p}{\hbar}\boldsymbol{g}_\pm.\tag{6.3.1.32b}$$

6.3.2 方程的解

求解方程时用矢量形式的方程比较方便.对于能量确定的状态

$$\begin{cases}\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\omega t},\\E=\hbar\omega.\end{cases}\tag{6.3.2.1}$$

波动方程(6.3.1.21b)合并成一个方程

$$\nabla\times\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r})-\frac{\omega}{c}\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r})=0.\tag{6.3.2.2a}$$

一、平面波

当动量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ 与能量同时确定时

$$\boldsymbol{g}_{\pm}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{g}_{\pm}(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{6.3.2.3}$$

把它代入方程(6.3.2.2a),展开后的三个方程为

$$\begin{cases}\pm\mathrm{i}(k_y g_{z\pm}-k_z g_{y\pm})-\dfrac{\omega}{c}g_{x\pm}=0,\\ \pm\mathrm{i}(k_z g_{x\pm}-k_x g_{z\pm})-\dfrac{\omega}{c}g_{y\pm}=0,\\ \pm\mathrm{i}(k_x g_{y\pm}-k_y g_{x\pm})-\dfrac{\omega}{c}g_{z\pm}=0.\end{cases}$$

于是可得能量和动量的关系(只讨论正能态)

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2=k^2,\quad 即\ \frac{\omega}{c}=k. \tag{6.3.2.4}$$

以及波函数

$$\begin{cases}g_{x\pm}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{k_xk_z\mp\mathrm{i}kk_y}{\sqrt{2k^2(k_x^2+k_y^2)}}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)},\\ g_{y\pm}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{k_yk_z\pm\mathrm{i}kk_x}{\sqrt{2k^2(k_x^2+k_y^2)}}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)},\\ g_{z\pm}(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{k_z^2-k^2}{\sqrt{2k^2(k_x^2+k_y^2)}}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}.\end{cases} \tag{6.3.2.5}$$

容易验证正反粒子的波函数满足

$$\boldsymbol{g}_{\mp}=\boldsymbol{g}_{\pm}^{*}.$$

也容易验证粒子的速度确为时空当量 c.

粒子的螺旋度

$$\nabla\times\boldsymbol{g}_{\pm}=s_p\,\frac{p}{\hbar}\boldsymbol{g}_{\pm}=\frac{\omega}{c}\boldsymbol{g}_{\pm}.$$

所以

$$s_p=\pm 1. \tag{6.3.2.6}$$

表明粒子的自旋为1,正反粒子分别是右旋性和左旋性的.

二、圆柱面波

动量和角动量的 z 向分量 $\hat{p}_z$ 和 $\hat{J}_z$ 与能量 $\hat{E}$ 同时确定时为圆柱面波.

用圆柱坐标系(ρ,φ,z),z 向动量与能量同时确定使波函数的形状为

$$\begin{cases}\boldsymbol{g}_{\pm}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{g}_{\pm}(\rho,\varphi)\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(k_zz-\omega t)},\\ E=\hbar\omega,\quad p_z=\hbar k_z.\end{cases} \tag{6.3.2.7}$$

角动量 z 向分量的本征方程(6.3.1.30b)的三个分量式是

$$\begin{cases}\dfrac{\partial g_{x\pm}}{\partial\varphi}+g_{y\pm}=\mathrm{i}mg_{x\pm},\\ \dfrac{\partial g_{y\pm}}{\partial\varphi}-g_{x\pm}=\mathrm{i}mg_{y\pm},\\ \dfrac{\partial g_{z\pm}}{\partial\varphi}=\mathrm{i}mg_{z\pm}.\end{cases}$$

前两式给出

$$\frac{\partial(g_{x\pm}\pm\mathrm{i}g_{y\pm})}{\partial\varphi}=\mathrm{i}(m\pm1)(g_{x\pm}\pm\mathrm{i}g_{y}).$$

由于圆柱坐标与直角坐标有关系

$$g_{x\pm}\pm\mathrm{i}g_{y}=(g_{\rho\pm}\pm\mathrm{i}g_{\varphi})\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$$

使得波函数 $\boldsymbol{g}$ 在圆柱坐标系中的三个分量 $g_{\rho\pm}$，$g_{\varphi\pm}$ 和 $g_{z\pm}$ 有共同的因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$，波函数的单值性使 J_z 的量子数 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$.

波动方程(6.3.2.2a)的三个分量方程为

$$\begin{cases}kg_{\rho\pm}=\pm\,\mathrm{i}m\dfrac{g_{z\pm}}{\rho}\mp\mathrm{i}k_zg_{\varphi\pm},\\ kg_{\varphi\pm}=\pm\,\mathrm{i}k_zg_{\rho\pm}-\dfrac{\partial g_{z\pm}}{\partial\rho},\\ kg_{z\pm}=\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial(\rho g_{\varphi\pm})}{\partial\rho}\mp\mathrm{i}m\dfrac{g_{\rho\pm}}{\rho}.\end{cases}$$

其中 $k=\frac{\omega}{c}$. 由前两式解出

$$\begin{cases}g_{\rho\pm}=\pm\left(\mathrm{i}m\dfrac{k}{k_\rho}\dfrac{g_{z\pm}}{k_\rho\rho}+\mathrm{i}\dfrac{k_z}{k_\rho}\dfrac{\partial g_{z\pm}}{k_\rho\partial\rho}\right),\\ g_{\varphi\pm}=-\left(m\dfrac{k_z}{k_\rho}\dfrac{g_{z\pm}}{k_\rho\rho}+\dfrac{k}{k_\rho}\dfrac{\partial g_{z\pm}}{k_\rho\partial\rho}\right).\end{cases}$$

其中 $k_\rho^2=k^2-k_z^2$. 代入后一式后得到了 $g_{z\pm}$ 满足的是 m 阶贝塞尔方程

$$\frac{1}{k_\rho\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)}\left[k_\rho\rho\frac{\mathrm{d}g_{z\pm}}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)}\right]+\left[1-\frac{m^2}{(k_\rho\rho)^2}\right]g_{z\pm}=0.$$

其解为普遍的 m 阶柱函数

$$g_{z\pm}=Z_m(k_\rho\rho).$$

当 ρ 限制在有限区域内时，Z_m 用贝塞尔函数；当 ρ 要趋于∞的区域时，Z_m 用第一类汉克函数. 圆柱面波是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r},t)=N\bigg\{&\left[\pm\,\mathrm{i}m\frac{k}{k_\rho}\frac{Z_m}{k_\rho\rho}+\mathrm{i}\frac{k_z}{k_\rho}\frac{\mathrm{d}Z_m}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)}\right]\boldsymbol{e}_\rho\\ &-\left[\left(m\frac{k_z}{k_\rho}\frac{Z_m}{k_\rho\rho}+\frac{k}{k_\rho}\frac{\mathrm{d}Z_m}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)}\right)\right]\boldsymbol{e}_\varphi+Z_m\boldsymbol{e}_z\bigg\}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(k_zz+m\varphi-\omega t)}.\end{aligned}\qquad(6.3.2.8)$$

三、球面波

角动量 z 向分量、角动量平方以及能量同时确定的状态为球面波.

用球坐标系(r,θ,φ)、z 向角动量和能量同时确定使波函数形如

$$\boldsymbol{g}_\pm(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{g}_\pm(r,\theta)\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}(m\varphi-\omega t)}. \tag{6.3.2.9}$$

角动量平方的本征方程(6.3.1.30b)式中的项

$$\hat{\boldsymbol{L}}\times\boldsymbol{g}_\pm=-\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\times\nabla)\times\boldsymbol{g}_\pm=\mathrm{i}\hbar[\boldsymbol{g}_\pm-\nabla(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{g}_\pm)].$$

此式中应用了 $\nabla\cdot\boldsymbol{g}_\pm=0$. 这样角动量平方的本征方程(6.3.1.30b)化成了

$$-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\boldsymbol{g}_\pm-2\nabla(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{g}_\pm)+j(j+1)\boldsymbol{g}_\pm=0. \tag{6.3.2.10}$$

在 $\boldsymbol{g}_\pm(r,\theta)$中的径向分量 $g_{r\pm}(r,\theta)$中消去 $\nabla\cdot\boldsymbol{g}_\pm=0$ 的项后成为

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial g_{r\pm}}{\partial\theta}\right)+\left[j(j+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]g_{r\pm}=0.$$

所以,$g_{r\pm}(r,\theta)$中与 θ 有关的因子是连带勒让德函数 $\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)$.

另一方面,取波动方程(6.3.2.2a)的旋度为

$$\nabla\times(\nabla\times\boldsymbol{g}_\pm)=\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{g}_\pm)-\nabla^2\boldsymbol{g}_\pm=k\nabla\times\boldsymbol{g}_\pm=k^2\boldsymbol{g}_\pm.$$

得到了亥姆霍兹方程

$$\nabla^2\boldsymbol{g}_\pm+k^2\boldsymbol{g}_\pm=\frac{1}{r}\frac{\partial^2(r\boldsymbol{g}_\pm)}{\partial r^2}-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\frac{\boldsymbol{g}_\pm}{r^2}+k^2\boldsymbol{g}_\pm=0.$$

将(6.3.2.10)式代入此式后成为

$$r\frac{\partial^2(r\boldsymbol{g}_\pm)}{\partial r^2}+2\nabla(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{g}_\pm)+[k^2r^2-j(j+1)]\boldsymbol{g}_\pm=0. \tag{6.3.2.11a}$$

它的三个分量的方程是

$$\begin{cases}r\dfrac{\partial^2(rg_{r\pm})}{\partial r^2}+2\dfrac{\partial(rg_{r\pm})}{\partial r}+[k^2r^2-j(j+1)]g_{r\pm}=0,\\ r\dfrac{\partial^2(rg_{\theta\pm})}{\partial r^2}+2\dfrac{\partial(rg_{r\pm})}{r\partial\theta}+[k^2r^2-j(j+1)]g_{\theta\pm}=0,\\ r\dfrac{\partial^2(rg_{\varphi\pm})}{\partial r^2}+2\dfrac{\partial(rg_{r\pm})}{r\sin\theta\partial\varphi}+[k^2r^2-j(j+1)]g_{\varphi\pm}=0.\end{cases} \tag{6.3.2.11b}$$

波动方程(6.3.2.2a)的三个分量的方程是

$$\begin{cases}\dfrac{1}{\sin\theta}\left[\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta g_{\varphi\pm})-\dfrac{\partial g_{\theta\pm}}{\partial\varphi}\right]=krg_{r\pm},\\ \dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\partial\varphi}-\dfrac{\partial(rg_{\varphi\pm})}{\partial r}=krg_{\theta\pm},\\ \dfrac{\partial(rg_{\theta\pm})}{\partial r}-\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\partial\theta}=krg_{\varphi\pm}.\end{cases} \tag{6.3.2.2b}$$

把(6.3.2.11b)式的后两式与(6.3.2.2b)式的后两式联立，可导出 $\boldsymbol{g}_{\pm}$ 三个分量之间的关系

$$\begin{cases} g_{\theta\pm} = \dfrac{1}{j(j+1)}\left(r\dfrac{\partial^2 g_{r\pm}}{\partial r\partial\theta} + 2\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\partial\theta} + kr\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\sin\theta\partial\varphi}\right), \\ g_{\varphi\pm} = \dfrac{1}{j(j+1)}\left(r\dfrac{\partial^2 g_{r\pm}}{\sin\theta\partial r\partial\varphi} + 2\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\sin\theta\partial\varphi} - kr\dfrac{\partial g_{r\pm}}{\partial\theta}\right). \end{cases}$$

用(6.3.2.11b)式的第一式来求 $\boldsymbol{g}_{\pm}$ 的径向分量 $g_{r\pm}$. 令

$$rg_{r\pm} = R_{\pm}(r) = \sum_{n=0}^{j} a_n \frac{e^{\pm ikr}}{r^{n+1}}.$$

代入(6.3.2.11b)式的第一式得到系数 a_n 的递推关系

$$a_{n+1} = \pm\frac{i}{2k}\frac{(j-n)(j+n+1)}{n+1}a_n, \quad n = 0,1,\cdots,j.$$

即

$$R_{\pm}(r) = \sum_{n=0}^{j}\left(\pm\frac{i}{2k}\right)^n \frac{(j+n)!}{n!(j-n)!}\frac{e^{\pm ikr}}{r^{n+1}}. \tag{6.3.2.12}$$

于是得球面波

$$\begin{cases} g_{r\pm}(\boldsymbol{r},t) = Nj(j+1)\dfrac{R_{\pm}}{r}P_j^m(\cos\theta)e^{\pm i(m\varphi-\omega t)}, \\ g_{\theta\pm}(\boldsymbol{r},t) = N\left[\dfrac{d(rR_{\pm})}{rdr}\dfrac{dP_j^m(\cos\theta)}{d\theta} \pm imkR_{\pm}\dfrac{P_j^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\right]e^{\pm i(m\varphi-\omega t)}, \\ g_{\varphi\pm}(\boldsymbol{r},t) = N\left[-kR_{\pm}\dfrac{dP_j^m(\cos\theta)}{d\theta} \pm im\dfrac{d(rR_{\pm})}{rdr}\dfrac{P_j^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\right]e^{\pm i(m\varphi-\omega t)}. \end{cases} \tag{6.3.2.13}$$

其中 N 是归一化常数.

总之，本节叙述了一对静质量为 0，自旋为 1，以三维空间矢量为波函数的波动方程. 他们不具正反变换和宇称变换的不变性，但却是一对方程之间的互变. 其中一个方程描述的是右旋性粒子，另一个则描述左旋性的粒子. 不过这些还仅是理论上的推测，实践中还未见有发现了这类粒子的报道.

§6.4 光子的波动方程

现行的量子力学是把静质量为 0 的克莱因-戈尔登方程，即达朗贝尔方程

$$(\hat{E}^2 - c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2)\psi = 0.$$

作为光子的波动方程的. 波函数 ψ 采用的是四维时空中的四矢量电磁势 $\left(\frac{i}{c}\varphi, \boldsymbol{a}\right)$，并给它附加了一个约束条件

$$\nabla\cdot\boldsymbol{a} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0.$$

称为洛伦兹规范.

由于方程对时间是二阶导数的，因此波函数的模方 $\psi^{\dagger}\psi$ 不再能够被当做光子的概率密度，与波函数的统计诠释不再一致.

我们试图建立一个对时间是一阶导数的光子的波动方程，以便保留对波函数的统计诠释.

6.4.1　波动方程的建立

在§6.3 中我们已经知道一个三维空间的矢量在增加一个恒为 0 的第四分量以后，也可以作为波函数，用来描述微观粒子的状态. 然而由于其方程是一对，它们中的任何一个都不具正反变换和宇称变换的不变性，因此不能直接用来描述光子. 为此我们作些技术处理，使它们成为光子的波动方程.

一、双元矢量场

定义双元数

$$D = A + \eta B. \tag{6.4.1.1}$$

其中 η 是与 i 不同的另一个虚数单位，即 $\eta^2 = -1$，但 η 和 i 在一起时不发生运算，$\eta\mathrm{i} = \mathrm{i}\eta \neq -1$，它只用来区分双元数 D 中两个不同的元. 分别称(6.4.1.1)式中的 A 和 B 为双元数的甲元和乙元. 甲、乙两元本身还可以是复数而形成双元复数.

一个双元复数 D 可定义三个与它共轭的双元复数：双元共轭 $\bar{D}$，复共轭 D^* 和厄米共轭 $D^{\dagger}$，其中

$$\begin{cases} \bar{D} = A - \eta B, & (6.4.1.2\text{a}) \\ D^* = A^* + \eta B^*, & (6.4.1.2\text{b}) \\ D^{\dagger} = A^* - \eta B^* = (\bar{D})^* = \bar{D}^*. & (6.4.1.2\text{c}) \end{cases}$$

把电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场 $\boldsymbol{H}$ 组合成双元矢量场

$$\boldsymbol{g}_{\pm} = \frac{1}{2}(\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{H} \mp \eta\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{E}). \tag{6.4.1.3}$$

这样 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 本身还可以是复的，以便人们再用复因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ 来描述电磁场的位相.

二、波动方程

应用双元矢量场(6.4.1.3)式，麦克斯韦方程组可以简写成

$$\begin{cases} \nabla \times \boldsymbol{g}_{\pm} \mp \dfrac{\eta}{c}\dfrac{\partial \boldsymbol{g}_{\pm}}{\partial t} = \dfrac{\sqrt{\mu_0}}{2}\boldsymbol{j}, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{g}_{\pm} = \mp \dfrac{\sqrt{\mu_0}}{2}\eta c\rho. \end{cases} \tag{6.4.1.4}$$

或用矩阵写法

$$\begin{bmatrix} \hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix}=\frac{\sqrt{\mu_0}}{2}\eta\mathrm{i}\,\hbar c\begin{bmatrix} J_+ \\ -J_- \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.5}$$

方程(6.4.1.4)或(6.4.1.5)就成了光子的波动方程.其中

$$\hat{E}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\quad \hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla,\quad G_\pm=\begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_\pm \\ 0 \end{bmatrix},\quad J_\pm=\begin{bmatrix} \boldsymbol{j} \\ \pm\eta c\rho \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.6}$$

而

$$\beta_x=\eta\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \beta_y=\eta\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix},\quad \beta_z=\eta\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.4.1.7}$$

则是三个阵迹为 0 的自伴矩阵,且满足

$$\beta_x\beta_y=-\beta_y\beta_x=\eta\beta_z,\quad \beta_y\beta_z=-\beta_z\beta_y=\eta\beta_x,\quad \beta_z\beta_x=-\beta_x\beta_z=\eta\beta_y.$$

应用双元矢量场(6.4.1.3),电磁场的能量密度和能流密度分别是

$$\begin{cases} u=\boldsymbol{g}_-\cdot\boldsymbol{g}_++\boldsymbol{g}_+\cdot\boldsymbol{g}_-=\dfrac{1}{2}(\mu_0H^2+\varepsilon_0E^2), \\ \boldsymbol{S}=-2\eta c(\boldsymbol{g}_-\times\boldsymbol{g}_+-\boldsymbol{g}_+\times\boldsymbol{g}_-)=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}. \end{cases} \tag{6.4.1.8}$$

三、方程的变换性质

1. 惯性系变换不变性

用 M 表示时空中四矢量的变换矩阵,Λ 表示双元矢量场的变换矩阵,即

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}' \\ \eta ct' \end{bmatrix}=M_+\begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \eta ct \end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_+' \\ 0 \end{bmatrix}=\Lambda_+\begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_+ \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{r}' \\ -\eta ct' \end{bmatrix}=M_-\begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ -\eta ct \end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_-' \\ 0 \end{bmatrix}=\Lambda_-\begin{bmatrix} \boldsymbol{g}_- \\ 0 \end{bmatrix}.$$

对于沿 x,y,z 以速率 βc 运动的惯性系变换,变换矩阵分别为

$$M_{x\pm}=\begin{bmatrix} \gamma & 0 & 0 & \pm\eta\beta\gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mp\eta\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{bmatrix},\quad M_{y\pm}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & \pm\eta\beta\gamma \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \mp\eta\beta\gamma & 0 & \gamma \end{bmatrix},$$

$$M_{z\pm}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & \pm\eta\beta\gamma \\ 0 & 0 & \mp\eta\beta\gamma & \gamma \end{bmatrix}, \tag{6.4.1.9a}$$

和

$$\Lambda_{x\pm}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&\gamma&\pm\eta\beta\gamma&0\\0&\mp\eta\beta\gamma&\gamma&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},\quad \Lambda_{y\pm}=\begin{bmatrix}\gamma&0&\mp\eta\beta\gamma&0\\0&1&0&0\\\pm\eta\beta\gamma&0&\gamma&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},$$

$$\Lambda_{z\pm}=\begin{bmatrix}\gamma&\pm\eta\beta\gamma&0&0\\\mp\eta\beta\gamma&\gamma&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.9b}$$

直接由运算可证

$$\begin{bmatrix}\hat{E}'-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}'&0\\0&\hat{E}'+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}M_+&0\\0&M_-\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}&0\\0&\hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Lambda_+^{-1}&0\\0&\Lambda_-^{-1}\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.10}$$

表明波动方程(6.4.1.4)是洛伦兹协变的.从变换矩阵(6.4.1.9a)和(6.4.1.9b)的不同也表明了三维空间矢量与四维时空的四矢量其变换性质是不同的.

2. 绕空间轴旋转变换的不变性

对于绕空间轴 x,y,z 旋转 φ 角的坐标系变换,变换矩阵分别为

$$\begin{cases}M_{x+}=M_{x-}=\Lambda_{x+}=\Lambda_{x-}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&\cos\varphi&\sin\varphi&0\\0&-\sin\varphi&\cos\varphi&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},\\ M_{y+}=M_{y-}=\Lambda_{y+}=\Lambda_{y-}=\begin{bmatrix}\cos\varphi&0&-\sin\varphi&0\\0&1&0&0\\\sin\varphi&0&\cos\varphi&0\\0&0&0&1\end{bmatrix},\\ M_{z+}=M_{z-}=\Lambda_{z+}=\Lambda_{z-}=\begin{bmatrix}\cos\varphi&\sin\varphi&0&0\\-\sin\varphi&\cos\varphi&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}.\end{cases} \tag{6.4.1.11}$$

也可由直接运算来验证(6.4.1.10)式.

3. 宇称变换不变性

假设产生电磁场的电荷电流在空间是对称的,即

$$\rho_e(-\boldsymbol{r},t)=\rho_e(\boldsymbol{r},t).$$

由于 $\boldsymbol{j}_e=\rho_e\boldsymbol{v}$,故

$$\boldsymbol{j}_e(-\boldsymbol{r},t)=-\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r},t).$$

也即四电流源

$$J_{\pm}(-\boldsymbol{r},t)=-J_{\mp}(\boldsymbol{r},t). \tag{6.4.1.12}$$

宇称变换使方程(6.4.1.5)变成

$$\begin{bmatrix}\hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0\\ 0 & \hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G_+(-\boldsymbol{r},t)\\ G_-(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{\mu_0}}{2}\eta\mathrm{i}\hbar c\begin{bmatrix}J_+(-\boldsymbol{r},t)\\ -J_-(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}.$$

用常数矩阵$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$左乘上式的左右两端,因为

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0\\ 0 & \hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0\\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G_+(-\boldsymbol{r},t)\\ G_-(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}G_-(-\boldsymbol{r},t)\\ G_+(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}J_+(-\boldsymbol{r},t)\\ -J_-(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-J_-(-\boldsymbol{r},t)\\ J_+(-\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}.$$

所以,只要

$$G_{\pm}(-\boldsymbol{r},t)=G_{\mp}(\boldsymbol{r},t). \tag{6.4.1.13a}$$

那么方程(6.4.1.5)在宇称变换下是不变的.(6.4.1.13a)式意味着电磁场的宇称性质分别是

$$\begin{cases}\boldsymbol{H}(-\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t),\\ \boldsymbol{E}(-\boldsymbol{r},t)=-\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t).\end{cases} \tag{6.4.1.13b}$$

这是与实践相符的.

4. 正反变换不变性

波动方程(6.4.1.5)是由(6.4.1.4)的一对方程联立起来构成的.进行正反变换时,方程(6.4.1.4)是一对方程之间互变,联立起来后仍是方程(6.4.1.5),表明了光子的反粒子仍然是光子本身这一客观事实.

5. 电磁变换的对称性

在电磁学部分中,我们已经指出磁单极存在的可能性几乎不存在.然而不少实践中的问题用等效磁荷、磁流来处理却比较方便.例如波导中的横电波与横磁波相对应,多极辐射中的电 2^n 极辐射与磁 2^n 极辐射相对应等等.

我们可以虚拟有磁荷存在,其荷的密度与流的密度分别用 ρ_m 与 $\boldsymbol{j}_m$ 表示,这样产生电磁场的源,即波动方程(6.4.1.5)的右端应改写成

$$J_+=\begin{bmatrix}\boldsymbol{j}_e+\eta c\varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\\ \eta c(\rho_e+\eta c\varepsilon_0\rho_m)\end{bmatrix},\quad J_-=\begin{bmatrix}\boldsymbol{j}_e-\eta c\varepsilon_0\boldsymbol{j}_m\\ -\eta c(\rho_e-\eta c\varepsilon_0\rho_m)\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.14}$$

用常数矩阵$\begin{bmatrix}-\eta & 0\\ 0 & \eta\end{bmatrix}$左乘方程(6.4.1.5)得

$$\begin{bmatrix}-\eta & 0\\ 0 & \eta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0\\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta & 0\\ 0 & -\eta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-\eta & 0\\ 0 & \eta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G_+\\ G_-\end{bmatrix}$$
$$=\frac{\sqrt{\mu_0}}{2}\eta\mathrm{i}\hbar c\begin{bmatrix}-\eta & 0\\ 0 & \eta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}J_+\\ -J_-\end{bmatrix}.$$

使之成为

$$\begin{bmatrix}\hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0\\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G'_+\\ G'_-\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{\varepsilon_0}}{2}\eta\mathrm{i}\hbar c\begin{bmatrix}J'_+\\ -J'_-\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.15}$$

其中

$$\begin{cases}G'_+=-\eta G_+=\dfrac{1}{2}(-\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{E}-\eta\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{H}),\\[2mm] G'_-=\eta G_-=\dfrac{1}{2}(-\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{E}+\eta\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{H}),\\[2mm] J'_+=-\eta\sqrt{\dfrac{\mu_0}{\varepsilon_0}}J_+=\begin{bmatrix}\boldsymbol{j}_m-\eta c\mu_0\boldsymbol{j}_e\\ \eta c(\rho_m-\eta c\mu_0\rho_e)\end{bmatrix},\\[2mm] J'_-=\eta\sqrt{\dfrac{\mu_0}{\varepsilon_0}}J_-=\begin{bmatrix}\boldsymbol{j}_m+\eta c\mu_0\boldsymbol{j}_e\\ -\eta c(\rho_m+\eta c\mu_0\rho_e)\end{bmatrix}.\end{cases} \tag{6.4.1.16}$$

把(6.4.1.15)和(6.4.1.16)式分别与(6.4.1.5)和(6.4.1.6)式相对照，只要把(6.4.1.5)和(6.4.1.6)式中的物理量作如下代换：

$$\begin{cases}\text{把}\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{H}\text{换成}-\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{E},\ \text{把}\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{E}\text{换成}\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{H},\\ \text{把}\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{j}_e\text{换成}\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{j}_m,\ \text{把}\sqrt{\varepsilon_0}\boldsymbol{j}_m\text{换成}\sqrt{\mu_0}\boldsymbol{j}_e.\end{cases} \tag{6.4.1.17}$$

那么，原本是用(6.4.1.5)式来处理的 $\rho_m=0,\boldsymbol{j}_m=0$ 的实际问题，就可以等效地当做 $\rho_e=0,\boldsymbol{j}_e=0$ 的问题用(6.4.1.15)式来处理，而方程(6.4.1.15)与原方程(6.4.1.5)的形状是完全相同的. 这种电和磁间变换的具体意义在于，由电性的源 $\rho_e,\boldsymbol{j}_e$ 产生的电磁场，在作(6.4.1.17)式的变换后也就等效地成了磁性的源 $\rho_m,\boldsymbol{j}_m$ 产生的电磁场了，这样体现了电和磁间的对称性. 下文的解例会明显地表现出波动方程(6.4.1.5)这种电和磁间的对称性，与此相对照，用电磁势作为波函数的达朗贝尔方程就没有这一功能了.

四、光子的算符

相应于波动方程(6.4.1.5)，光子的重要算符列于下：

1. 质量算符

光子的质量算符为

$$\hat{m} = \frac{1}{c}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.18}$$

2. 速度算符

用波函数的厄米共轭左乘波动方程，用波函数右乘波动方程的厄米共轭方程，然后两式相减

$$[G_+^\dagger, G_-^\dagger]\begin{bmatrix} \hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix} - \left(\begin{bmatrix} \hat{E}-c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \\ 0 & \hat{E}+c\boldsymbol{\beta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix}\right)^\dagger \begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix} = 0.$$

得到

$$\hat{E}\left([G_+^\dagger, G_-^\dagger]\begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix}\right) - \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left([G_+^\dagger, G_-^\dagger]\begin{bmatrix} c\boldsymbol{\beta} & 0 \\ 0 & -c\boldsymbol{\beta} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} G_+ \\ G_- \end{bmatrix}\right) = 0.$$

所以速度算符为

$$\hat{\boldsymbol{v}} = \begin{bmatrix} c\boldsymbol{\beta} & 0 \\ 0 & -c\boldsymbol{\beta} \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.19}$$

容易验证

$$\frac{1}{2}(\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}} + \hat{\boldsymbol{v}}\hat{m}) = \hat{\boldsymbol{p}}.$$

3. 角动量算符

由波动方程绕空间轴旋转 φ 角的变换矩阵(6.4.1.11)式，计算 $-\mathrm{i}\hbar\left.\frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi}\right|_{\varphi=0}$ 得自旋算符

$$\hat{\boldsymbol{S}} = -\mathrm{i}\hbar\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.20}$$

其中

$$\mu_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mu_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mu_z = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{6.4.1.21}$$

角动量算符则为

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{L}} - \mathrm{i}\hbar\begin{bmatrix}\boldsymbol{\mu} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\mu}\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.22}$$

角动量平方的算符为

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{L}^2 + 2\hbar^2 - 2\mathrm{i}\hbar\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{\mu} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{\mu}\end{bmatrix}. \tag{6.4.1.23}$$

由 $\hat{S}^2 = 2\hbar^2$,表明光子的自旋的量子数为整数 1. 其他的算符不再列出.

光子的概率密度(没有归一)

$$G_+^\dagger G_+ + G_-^\dagger G_- = \frac{1}{2}(\mu_0 \boldsymbol{H}^* \cdot \boldsymbol{H} + \varepsilon_0 \boldsymbol{E}^* \cdot \boldsymbol{E}).$$

概率流密度是

$$[G_+^\dagger, G_-^\dagger]\begin{bmatrix}c\boldsymbol{\beta} & 0\\ 0 & -c\boldsymbol{\beta}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}G_+\\ G_-\end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^* \times \boldsymbol{H} + \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}^*).$$

光子的概率密度和概率流密度分别正比于电磁场的能量密度和能流密度,这是直接由物理观念可以预料的结果.

6.4.2 波动方程的解例

光子的波动方程(6.4.1.5)是由一对互为双元共轭的方程(6.4.1.4)联立而成的. 其波函数也由一对互为双元共轭的电磁场 G_+ 和 G_- 共同来描述的. 每个函数 G_+ 或 G_- 均有四个元,因此光子的波函数是八元的. 看起来是复杂了,事实上却是简单了. 一方面是因为 G_+ 与 G_- 是双元共轭的,知道了一个另一个也就知道了;另一方面是因为 G_+ 和 G_- 的第四个元恒为 0,而且 G_+ 和 G_- 均退化为三维空间的矢量 $\boldsymbol{g}_+$ 和 $\boldsymbol{g}_-$,所以求解波动方程时只需求解 G_+ 和 G_- 中的任何一个.

我们求解 G_+,下面略去角标"+". 波动方程为

$$\begin{cases}\nabla \times \boldsymbol{g} - \dfrac{\eta}{c}\dfrac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial t} = \dfrac{\sqrt{\mu_0}}{2}\boldsymbol{j}_e,\\[2mm] \nabla \cdot \boldsymbol{g} = -\dfrac{\sqrt{\mu_0}}{2}\eta c \rho_e.\end{cases} \tag{6.4.2.1}$$

对于能量 $E = \hbar\omega$ 确定的状态,采用人们习惯上常用的位相因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$,则

$$\begin{cases}\rho_e(\boldsymbol{r},t) = \rho_e(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},\\ \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},\\ \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}.\end{cases} \tag{6.4.2.2}$$

由电流的连续性方程

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r},t) + \frac{\partial \rho_e(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = 0$$

知

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}) - \mathrm{i}\omega\rho_e(\boldsymbol{r}) = 0.$$

这样使方程(6.4.2.1)简化成了

$$\nabla \times \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}) + \eta\mathrm{i}\,\frac{\omega}{c}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}) = \frac{\sqrt{\mu_0}}{2}\boldsymbol{j}_e(\boldsymbol{r}). \tag{6.4.2.3}$$

在不存在电荷电流源的空间，上式的右端为 0. 有三种情形：平面波、圆柱面波以及球面波已在§6.3 中给出. 不过因为有 η 代换 i 的问题，为避免混淆，我们在本节中仍把结果列出来.

一、平面波

动量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ 和能量 $E=\hbar\omega$ 共同确定的状态是平面波

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t) = A\boldsymbol{g}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \tag{6.4.2.4a}$$

其中 $A=a+\eta b$ 是双元常数，$k=\frac{\omega}{c}$，而

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{k}) = \frac{k_z k_x - \eta k k_y}{2k\sqrt{k_x^2+k_y^2}}\boldsymbol{e}_x + \frac{k_y k_z + \eta k k_x}{2k\sqrt{k_x^2+k_y^2}}\boldsymbol{e}_y - \frac{k_x^2+k_y^2}{2k\sqrt{k_x^2+k_y^2}}\boldsymbol{e}_z. \tag{6.4.2.5}$$

由 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{g}=0$，表明光波中的电场 $\boldsymbol{E}$ 和磁场 $\boldsymbol{H}$ 与波的传播方向都垂直，所以光波是横波. 又由于 $\boldsymbol{g}$ 中的甲元与乙元点乘等于 0，因此 $\boldsymbol{E}\perp\boldsymbol{H}$.

在光波(6.4.2.4a)式中，若双元常数 A 中只有甲元 $a=1$，或只有乙元 $b=1$，那么

$$\begin{cases} \boldsymbol{g}^{(1)}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}, \\ \boldsymbol{g}^{(2)}(\boldsymbol{r},t) = \eta\boldsymbol{g}(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}. \end{cases} \tag{6.4.2.4b}$$

表明光波 $\boldsymbol{g}$ 中有且仅有两个偏振方向互相垂直的独立的平面波，而且容易验证这两个波的 $\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$ 总是沿着波的传播方向 $\boldsymbol{k}$ 的. 还可由速度算符(6.4.1.19)式验证光的速度确为 c.

二、柱面波

动量和角动量的 z 向分量 $p_z=\hbar k_z$ 和 $J_z=m\hbar$ 与能量 $E=\hbar\omega$ 同时确定时为柱面波

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t) = A\Big\{&\Big[\mathrm{i}\,\frac{k_z}{k_\rho}\,\frac{\mathrm{d}Z_m(k_\rho\rho)}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)} + \eta m\,\frac{k}{k_\rho}\,\frac{Z_m(k_\rho\rho)}{k_\rho\rho}\Big]\boldsymbol{e}_\rho \\ &+ \Big[\eta\mathrm{i}\,\frac{k}{k_\rho}\,\frac{\mathrm{d}Z_m(k_\rho\rho)}{\mathrm{d}(k_\rho\rho)} - m\,\frac{k_z}{k_\rho}\,\frac{Z_m(k_\rho\rho)}{k_\rho\rho}\Big]\boldsymbol{e}_\varphi + Z_m(k_\rho\rho)\boldsymbol{e}_z\Big\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_z z+m\varphi-\omega t)}.\end{aligned} \tag{6.4.2.6}$$

在圆柱面波(6.4.2.6)中，若常数 A 只有甲元，它是横电波；若 A 只有乙元，它就是

横磁波. TE 和 TM 两类相对应的波,波函数的空间分布相同,光子在空间的概率分布相同,体现了电和磁的对称性. 原先用电磁势来描述这两种场时,两种势的空间分布则不相同,电和磁的对称性被掩盖了.

三、球面波

角动量的 z 向分量 $J_z=m\hbar$、角动量平方 $J^2=j(j+1)\hbar^2$ 与能量 $E=\hbar\omega$ 同时确定时为球面波.

$$\begin{cases} g_r(\boldsymbol{r},t) = Aj(j+1)\dfrac{R(r)}{r}\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\varphi-\omega t)}, \\ g_\theta(\boldsymbol{r},t) = A\left[\dfrac{\mathrm{d}(rR)}{r\mathrm{d}r}\dfrac{\mathrm{d}\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} + \eta mkR\dfrac{\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\varphi-\omega t)}, \\ g_\varphi(\boldsymbol{r},t) = A\left[\eta\mathrm{i}kR\dfrac{\mathrm{d}\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)}{\mathrm{d}\theta} + \mathrm{i}m\dfrac{\mathrm{d}(rR)}{r\mathrm{d}r}\dfrac{\mathrm{P}_j^m(\cos\theta)}{\sin\theta}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m\varphi-\omega t)}. \end{cases} \tag{6.4.2.7}$$

其中

$$R(r) = \sum_{n=0}^{j}\left(\frac{\mathrm{i}}{2k}\right)^n\frac{(j+n)!}{n!(j-n)!}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r^{n+1}}. \tag{6.4.2.8}$$

在球面波(6.4.2.7)中,若双元常数 A 中只有甲元,则它表示从原点发出的磁 2^j 极辐射;若 A 中只有乙元,则它是从原点发出的电 2^j 极辐射. 两类相应的辐射,光子在空间的概率分布相同,角动量及其 z 向投影也相同. 若用电磁势作为光子的波函数时,这种电和磁间的对称性仍然被掩盖了.

值得一提的是,迄今对于点源的电、磁 2^j 极辐射,场的径向分量 g_r 往往被忽略. 这是因为在 $kr\gg1$ 的远场区

$$\begin{cases} R(r)\approx\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \\ \dfrac{\mathrm{d}(rR)}{r\mathrm{d}r}\approx\mathrm{i}k\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}. \end{cases}$$

从而有

$$g_r\ll g_\theta,\quad g_r\ll g_\varphi.$$

以可见光为例,$\lambda\sim5500\,\mathrm{A}$,即使在 $r\sim1\,\mathrm{cm}$ 处,kr 也有 10^5 的数量级,略去 g_r 是很自然的. 然而,如果是研究近场光学,场的径向分量就不再能轻易地被忽略了.

§6.5 静质量非 0、自旋为 1 的波动方程

迄今,对于静质量 $E_0\neq0$、自旋为 1 的粒子的相对论波动方程,在量子力学中尚未见有过讨论. 我们认为,依照建立波动方程的普遍法则,可以在三级四元数

(8×8 矩阵)领域建立起这种粒子的相对论性波动方程.

6.5.1　波动方程和波函数条件

一、波动方程的建立

把克莱因-戈尔登方程看成是三级四元数领域的方程,进行因式分解.取

$$\hat{H} = c(\hat{p}_z \boldsymbol{i} + \hat{p}_y \boldsymbol{j} + \hat{p}_x \boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3 + \mathrm{i}E_0 \boldsymbol{j}_3. \tag{6.5.1.1}$$

则波动方程为

$$(\hat{E} - \hat{H})\psi = 0. \tag{6.5.1.2a}$$

它的矩阵形式是

$$\begin{bmatrix} \hat{E} + c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} & -\mathrm{i}E_0 \\ +\mathrm{i}E_0 & \hat{E} - c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} = 0. \tag{6.5.1.2b}$$

其中,波函数的四元数形式为

$$\psi = [(F_1 u_1 + F_2 v_1)u_2 + (F_3 u_1 + F_4 v_1)v_2]u_3 + [(G_1 u_1 + G_2 v_1)u_2 + (G_3 u_1 + G_4 v_1)v_2]v_3. \tag{6.5.1.3a}$$

矩阵形式为

$$\psi = \begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} G_1 \\ G_2 \\ G_3 \\ G_4 \end{bmatrix}. \tag{6.5.1.3b}$$

在(6.5.1.2b)式中:

$$\Sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \Sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \Sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{6.5.1.4}$$

是三个阵迹为 0 的自伴矩阵.在狄拉克理论中,它们是粒子的三个自旋矩阵,但在波动方程(6.5.1.2b)中,它们并不是自旋矩阵,而是与粒子的速度有关的矩阵(见下文),不要混淆.

用算符

$$\hat{E} + c(\hat{p}_z \boldsymbol{i} + \hat{p}_y \boldsymbol{j} + \hat{p}_x \boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3 + \mathrm{i}E_0 \boldsymbol{j}_3 = \begin{bmatrix} \hat{E} - c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} & \mathrm{i}E_0 \\ -\mathrm{i}E_0 & \hat{E} + c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}$$

作用于方程(6.5.1.2)后,就使其还原成了克莱因-戈尔登方程,表明波动方程

(6.5.1.2)确实是由克莱因-戈尔登方程的一种因式分解方式导出的结果.

二、波函数条件

把波动方程(6.5.1.2)展开成八个分量方程

$$\begin{cases}\left(\frac{\hat{E}}{c}+\hat{p}_z\right)F_1+(\hat{p}_x-\mathrm{i}\hat{p}_y)F_2-\mathrm{i}\frac{E_0}{c}G_1=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}-\hat{p}_z\right)F_2+(\hat{p}_x+\mathrm{i}\hat{p}_y)F_1-\mathrm{i}\frac{E_0}{c}G_2=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}+\hat{p}_z\right)F_3+(\hat{p}_x-\mathrm{i}\hat{p}_y)F_4-\mathrm{i}\frac{E_0}{c}G_3=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}-\hat{p}_z\right)F_4+(\hat{p}_x+\mathrm{i}\hat{p}_y)F_3-\mathrm{i}\frac{E_0}{c}G_4=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}-\hat{p}_z\right)G_1-(\hat{p}_x-\mathrm{i}\hat{p}_y)G_2+\mathrm{i}\frac{E_0}{c}F_1=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}+\hat{p}_z\right)G_2-(\hat{p}_x+\mathrm{i}\hat{p}_y)G_1+\mathrm{i}\frac{E_0}{c}F_2=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}-\hat{p}_z\right)G_3-(\hat{p}_x-\mathrm{i}\hat{p}_y)G_4+\mathrm{i}\frac{E_0}{c}F_3=0,\\ \left(\frac{\hat{E}}{c}+\hat{p}_z\right)G_4-(\hat{p}_x+\mathrm{i}\hat{p}_y)G_3+\mathrm{i}\frac{E_0}{c}F_4=0.\end{cases} \tag{6.5.1.5}$$

考察分量方程(6.5.1.5),波函数的八个元中分成了两组:$F_1F_2G_1G_2$ 和 $F_3F_4G_3G_4$,它们满足完全相同的两组方程.因此两组元之间必然还应满足一个与方程(6.5.1.2)相容的条件,称为波函数条件:第四分量与第一分量恒等,即

$$F_4\equiv F_1. \tag{6.5.1.6}$$

波动方程(6.5.1.2)和波函数条件(6.5.1.6)联立,构成了描述静质量非0、自旋为1的玻色子的波动方程.

由于四元数形式和矩阵形式在运算中各有自己的方便之处,因而在下文中两者并用.

三、方程和波函数条件的变换性质

1. 沿空间轴 $\boldsymbol{e}$ 以速率 $u=c\beta$ 运动的惯性系变换

把波动方程(6.5.1.2)的变换表示成

$$M\left[\frac{\hat{E}}{c}-(\hat{p}_z\boldsymbol{i}+\hat{p}_y\boldsymbol{j}+\hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3-\mathrm{i}\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right]\Lambda^{-1}\Lambda\psi=0. \tag{6.5.1.7}$$

那么

$$\begin{cases} M = (a - \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3), \\ \Lambda = (a - \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a - b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3), \\ \Lambda^{-1} = (a + \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3). \end{cases} \tag{6.5.1.8}$$

其中 $a=\sqrt{\dfrac{\gamma+1}{2}}, b=\sqrt{\dfrac{\gamma-1}{2}}, \gamma=\dfrac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$. 则有 $a^2-b^2=1, a^2+b^2=\gamma, 2ab=\gamma\beta$. 而

$$\begin{cases} \boldsymbol{e} = \cos\alpha_z\boldsymbol{i} + \cos\alpha_y\boldsymbol{j} + \cos\alpha_x\boldsymbol{k}, \\ \boldsymbol{e}_2 = -\cos\alpha_z\boldsymbol{i}_2 - \cos\alpha_y\boldsymbol{j}_2 + \cos\alpha_x\boldsymbol{k}_2. \end{cases} \tag{6.5.1.9}$$

这里 $\cos\alpha_x, \cos\alpha_y, \cos\alpha_z$ 是矢量 $\boldsymbol{e}$ 依次对 x 轴、y 轴、z 轴的方向余弦. (6.5.1.9)式是它们四元数的表示方法,原因是在方程(6.5.1.7)中,动量算符采用的四元数表示方法是

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}$$

所致.

把(6.5.1.8)式代入(6.5.1.7)式,用四元数算法进行运算

$$(a - \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3)\left(\frac{\hat{E}}{c} - \hat{\boldsymbol{p}}\,\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right)(a + \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3)$$

$$= (a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3)\left(\frac{\hat{E}}{c} - \hat{\boldsymbol{p}}\,\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right)(a + b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3)$$

$$= \gamma\frac{\hat{E}}{c} - \gamma\beta\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{e} - \left[\left(\gamma\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{e} - \gamma\beta\frac{\hat{E}}{c}\right)\boldsymbol{e} + \hat{\boldsymbol{p}} - (\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{e})\boldsymbol{e}\right]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3$$

$$= \begin{cases} \gamma\dfrac{\hat{E}}{c} - \gamma\beta\hat{p}_x - \left[\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \left(\gamma\hat{p}_x - \gamma\beta\dfrac{\hat{E}}{c}\right)\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\ \qquad \text{当 } \cos\alpha_x = 1\text{, 即沿 } x \text{ 轴运动时}, \\ \gamma\dfrac{\hat{E}}{c} - \gamma\beta\hat{p}_y - \left[\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \left(\gamma\hat{p}_y - \gamma\beta\dfrac{\hat{E}}{c}\right)\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\ \qquad \text{当 } \cos\alpha_y = 1\text{, 即沿 } y \text{ 轴运动时}, \\ \gamma\dfrac{\hat{E}}{c} - \gamma\beta\hat{p}_z - \left[\left(\gamma\hat{p}_z - \gamma\beta\dfrac{\hat{E}}{c}\right)\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}\right]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\ \qquad \text{当 } \cos\alpha_z = 1\text{, 即沿 } z \text{ 轴运动时}. \end{cases}$$

上式证明,波动方程(6.5.1.2)是洛伦兹协变的.

波函数的变换为

$$\psi' = \Lambda\psi = (a - \mathrm{i}b\boldsymbol{e}_2)(a - b\boldsymbol{e}\boldsymbol{i}_3)\psi.$$

略去冗繁的运算过程,算得 ψ' 的第一分量和第四分量分别为

$$
\begin{cases}
F_1' = (a - b\cos\alpha_z)(a + b\cos\alpha_z)F_1 + b(a - b\cos\alpha_z)(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_2 \\
\qquad + b(a + b\cos\alpha_z)(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_3 + b^2(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_4, \\
F_4' = b^2(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_1 + b(a - b\cos\alpha_z)(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_2 \\
\qquad + b(a + b\cos\alpha_z)(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_3 + (a + b\cos\alpha_z)(a - b\cos\alpha_z)F_4.
\end{cases}
$$

如果在原惯性系中 $F_4 = F_1$，那么在新的惯性系中仍有 $F_4' = F_1'$，所以波函数条件(6.5.1.6)也是洛伦兹协变的.

2. 绕空间轴 $\boldsymbol{e}$ 旋转 φ 角的变换

这时在(6.5.1.7)式中

$$
M = \Lambda = \left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}_2\right). \qquad (6.5.1.10)
$$

把(6.5.1.10)式代入(6.5.1.7)式

$$
\begin{aligned}
&\left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}_2\right)\left(\frac{\hat{E}}{c} - \hat{\boldsymbol{p}}\,\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right) \\
&\quad\left(\cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}_2\right) \\
&= \left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\left(\frac{\hat{E}}{c} - \hat{\boldsymbol{p}}\,\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right) \\
&= \frac{\hat{E}}{c} - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3 - \left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\hat{\boldsymbol{p}}\left(\cos\frac{\varphi}{2} - \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\boldsymbol{i}_3 \\
&= \frac{\hat{E}}{c} - [\cos\varphi\hat{\boldsymbol{p}} + (1 - \cos\varphi)(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{e})\boldsymbol{e} - \sin\varphi\hat{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{e}]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3 \\
&= \begin{cases}
\dfrac{\hat{E}}{c} - [(\hat{p}_z\cos\varphi - \hat{p}_y\sin\varphi)\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y\cos\varphi + \hat{p}_z\sin\varphi)\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k}]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\
\qquad \text{当 } \cos\alpha_x = 1\text{，即绕 } x \text{ 轴旋转，} \\
\dfrac{\hat{E}}{c} - [(p_z\cos\varphi + p_x\sin\varphi)\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x\cos\varphi - \hat{p}_z\sin\varphi)\boldsymbol{k}]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\
\qquad \text{当 } \cos\alpha_y = 1\text{，即绕 } y \text{ 轴旋转，} \\
\dfrac{\hat{E}}{c} - [\hat{p}_z\boldsymbol{i} + (\hat{p}_y\cos\varphi - \hat{p}_x\sin\varphi)\boldsymbol{j} + (\hat{p}_x\cos\varphi + \hat{p}_y\sin\varphi)\boldsymbol{k}]\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\,\dfrac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3, \\
\qquad \text{当 } \cos\alpha_z = 1\text{，即绕 } z \text{ 轴旋转.}
\end{cases}
\end{aligned}
$$

上式表明，绕空间轴旋转的坐标系变换，波动方程(6.5.1.2)也是协变的.

波函数的变换为

$$
\psi' = \Lambda\psi = \left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}\right)\left(\cos\frac{\varphi}{2} + \sin\frac{\varphi}{2}\boldsymbol{e}_2\right)\psi.
$$

算出变换后，第一个元与第四个元为

$$\begin{cases} F_1' = (c - \mathrm{i}s\cos\alpha_z)(c + \mathrm{i}s\cos\alpha_z)F_1 + \mathrm{i}s(c - \mathrm{i}s\cos\alpha_z)(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_2 \\ \qquad + \mathrm{i}s(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)(c + \mathrm{i}s\cos\alpha_z)F_3 - s^2(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_4, \\ F_4' = -s^2(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)F_1 + \mathrm{i}s(\cos\alpha_x - \mathrm{i}\cos\alpha_y)(c - \mathrm{i}s\cos\alpha_z)F_2 \\ \qquad + \mathrm{i}s(\cos\alpha_x + \mathrm{i}\cos\alpha_y)(c + \mathrm{i}s\cos\alpha_z)F_3 + (c - \mathrm{i}s\cos\alpha_z)(c + \mathrm{i}s\cos\alpha_z)F_4. \end{cases}$$

表明，如果在原坐标系中 $F_4 = F_1$，那么在绕空间轴 $\boldsymbol{e}$ 旋转 φ 角后的新坐标系中仍有 $F_4' = F_1'$，波函数条件(6.5.1.6)对坐标系的旋转变换也是不变的.

3. 宇称变换

宇称变换使方程(6.5.1.2)变成了

$$\left[\frac{\hat{E}}{c} + (\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right]\psi(-\boldsymbol{r}) = 0.$$

如果在(6.5.1.7)式中，取

$$M = \Lambda = \boldsymbol{j}_3. \tag{6.5.1.11}$$

那么

$$\boldsymbol{j}_3\left[\frac{\hat{E}}{c} - (\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3\right](-\boldsymbol{j}_3)$$

$$= \frac{\hat{E}}{c} + (\hat{p}_z\boldsymbol{i} + \hat{p}_y\boldsymbol{j} + \hat{p}_x\boldsymbol{k})\boldsymbol{i}_3 - \mathrm{i}\frac{E_0}{c}\boldsymbol{j}_3$$

就是宇称变换后方程中的算符，所以

$$\psi(-\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{j}_3\psi(\boldsymbol{r}). \tag{6.5.1.12a}$$

即

$$\begin{bmatrix} F(-\boldsymbol{r}) \\ G(-\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G(\boldsymbol{r}) \\ -F(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix}. \tag{6.5.1.12b}$$

4. 正反变换

讨论正反变换时，以带电 q 的粒子在电磁场$(\boldsymbol{a},\varphi)$作用下的波动方程较为清楚. 这时波动方程(6.5.1.2)的形式为

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\hat{E} - q\varphi}{c} + (\hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma} & -\mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} \\ \mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} & \dfrac{\hat{E} - q\varphi}{c} - (\hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} = 0. \tag{6.5.1.13}$$

把它的复共轭方程

$$\begin{bmatrix} -\dfrac{\hat{E} + q\varphi}{c} - (\hat{\boldsymbol{p}} + q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma}^* & \mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} \\ -\mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} & -\dfrac{\hat{E} + q\varphi}{c} + (\hat{\boldsymbol{p}} + q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma}^* \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F^* \\ G^* \end{bmatrix} = 0. \tag{6.5.1.14}$$

与反粒子方程

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\hat{E}+q\varphi}{c}+(\hat{\boldsymbol{p}}+q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma} & -\mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} \\ \mathrm{i}\dfrac{E_0}{c} & \dfrac{\hat{E}+q\varphi}{c}-(\hat{\boldsymbol{p}}+q\boldsymbol{a})\cdot\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F^c \\ G^c \end{bmatrix}=0 \tag{6.5.1.15}$$

进行比较,只需

$$\begin{bmatrix} F_1^c \\ F_2^c \\ F_3^c \\ F_4^c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -G_4^* \\ G_3^* \\ G_2^* \\ -G_1^* \end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix} G_1^c \\ G_2^c \\ G_3^c \\ G_4^c \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} F_4^* \\ -F_3^* \\ -F_2^* \\ F_1^* \end{bmatrix} \tag{6.5.1.16}$$

两式完全相同.这就表明波动方程(6.5.1.2)同时描述了一对正、反粒子,具有正反变换的不变性.

四、粒子的算符

由波动方程(6.5.1.2)所描述的粒子的各重要算符如下:

1. 相对论性质量算符

粒子的相对论性质量算符为

$$\hat{m}=\frac{\hat{H}}{c^2}=\begin{bmatrix} -\dfrac{1}{c}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} & \mathrm{i}m_0 \\ -\mathrm{i}m_0 & \dfrac{1}{c}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}. \tag{6.5.1.17}$$

2. 速度算符

用$[F^\dagger,G^\dagger]$左乘方程(6.5.1.2),用$\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}$右乘方程(6.5.1.2)的厄米共轭方程,然后两式相减

$$[F^\dagger,G^\dagger]\begin{bmatrix} \hat{E}+c\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} & -\mathrm{i}E_0 \\ \mathrm{i}E_0 & \hat{E}-c\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}$$

$$-\left(\begin{bmatrix} \hat{E}+c\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} & -\mathrm{i}E_0 \\ \mathrm{i}E_0 & \hat{E}-c\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}\right)^\dagger\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}=0.$$

得到概率流的连续性方程

$$\hat{E}\left([F^\dagger,G^\dagger]\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}\right)=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left([F^\dagger,G^\dagger]\begin{bmatrix} -c\boldsymbol{\Sigma} & 0 \\ 0 & c\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix}\right)=0.$$

概率密度和概率流密度分别为

$$\begin{cases} u = [F^{\dagger}, G^{\dagger}]\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} = F^{\dagger}F + G^{\dagger}G, \\ \boldsymbol{S} = [F^{\dagger}, G^{\dagger}]\begin{bmatrix} -c\boldsymbol{\Sigma} & 0 \\ 0 & c\boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} F \\ G \end{bmatrix} = -F^{\dagger}c\boldsymbol{\Sigma}F + G^{\dagger}c\boldsymbol{\Sigma}G. \end{cases} \tag{6.5.1.18}$$

所以粒子的速度算符为

$$\hat{\boldsymbol{v}} = c\begin{bmatrix} -\boldsymbol{\Sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix}. \tag{6.5.1.19}$$

而式

$$\frac{1}{2}(\hat{m}\hat{\boldsymbol{v}} + \hat{\boldsymbol{v}}\hat{m}) \equiv \hat{\boldsymbol{p}}$$

表明上述算符的形式是自洽的.

3. 自旋算符

在坐标系绕空间轴旋转 φ 角后,波函数的变换四元数 Λ 示于(6.5.1.10)式中,由自旋在该旋轴上的投影

$$\hat{S} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Lambda}{\partial\varphi}\bigg|_{\varphi=0} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{e} + \boldsymbol{e}_2)$$

得到

$$\begin{cases} \hat{S}_x = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_2) = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_y = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{j} - \boldsymbol{j}_2) = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & \mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & -\mathrm{i} & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_z = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{i}_2) = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}; \end{cases} \tag{6.5.1.20}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{2}(3 + \boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2 + \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2) = \hbar^2\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}. \tag{6.5.1.21}$$

其中,I 是 4×4 的单位矩阵.

4. 角动量算符

角动量的 z 向投影算符为

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z = \hat{L}_z - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{i}_2) = \begin{bmatrix} \hat{L}_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{L}_z - \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{L}_z + \hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{L}_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

角动量平方的算符为

$$\frac{\hat{J}^2}{\hbar^2} = \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + \frac{\hat{S}^2}{\hbar^2} + \frac{2}{\hbar^2}\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + \frac{1}{2}(3 + \boldsymbol{i}\boldsymbol{i}_2 + \boldsymbol{j}\boldsymbol{j}_2 - \boldsymbol{k}\boldsymbol{k}_2)$$

$$- \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\hat{L}_x(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}_2) + \hat{L}_y(\boldsymbol{j} - \boldsymbol{j}_2) + \hat{L}_z(\boldsymbol{i} - \boldsymbol{i}_2)]$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + 1 & \frac{\hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & 1 \\ \frac{\hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + 2 - 2\frac{\hat{L}_z}{\hbar} & 0 & \frac{\hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} \\ \frac{\hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & 0 & \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + 2 + 2\frac{\hat{L}_z}{\hbar} & \frac{\hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} \\ 1 & \frac{\hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} + 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}.$$

6.5.2 方程的解

一、自由粒子的平面波

当动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 同时确定时，波函数中有共同的因子 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)}$.

$$\begin{cases} F(\boldsymbol{r},t) = f(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)}, \\ G(\boldsymbol{r},t) = g(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)}. \end{cases}$$

这时，粒子的螺旋度也能同时确定. 螺旋度的本征方程

$$\left(\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}\right)\psi = s_p \hbar \psi. \tag{6.5.2.1a}$$

其矩阵形式为

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & \hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y & \hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y & 0 \\ \hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y & -2\hat{p}_z & 0 & \hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y \\ \hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y & 0 & 2\hat{p}_z & \hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y \\ 0 & \hat{p}_x - \mathrm{i}\hat{p}_y & \hat{p}_x + \mathrm{i}\hat{p}_y & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_1 & G_1 \\ F_2 & G_2 \\ F_3 & G_3 \\ F_4 & G_4 \end{bmatrix} = s_p \begin{bmatrix} F_1 & G_1 \\ F_2 & G_2 \\ F_3 & G_3 \\ F_4 & G_4 \end{bmatrix}. \tag{6.5.2.1b}$$

其中 s_p 是螺旋度的量子数.展开(6.5.2.1b)式解得

$$\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ \dfrac{p_x + \mathrm{i}p_y}{s_p p + p_z} f_1 \\ \dfrac{p_x - \mathrm{i}p_y}{s_p p - p_z} f_1 \\ f_1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ g_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ \dfrac{p_x + \mathrm{i}p_y}{s_p p + p_z} g_1 \\ \dfrac{p_x - \mathrm{i}p_y}{s_p p - p_z} g_1 \\ g_1 \end{bmatrix}. \tag{6.5.2.2}$$

并有

$$s_p^2 = 1. \tag{6.5.2.3}$$

故螺旋度的量子数为

$$s_p = \pm 1. \tag{6.5.2.4}$$

这既表明波动方程(6.5.1.2)所描述的粒子的自旋为1,也表明粒子有左旋和右旋两种状态.再由波动方程(6.5.1.2)得到

$$\begin{cases} \mathrm{i}E_0 G = (\hat{E} + c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma})F, \\ \mathrm{i}E_0 F = -(\hat{E} - c\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma})G. \end{cases}$$

解得

$$\begin{cases} f_1 = A, \\ f_2 = \dfrac{p_x + \mathrm{i}p_y}{s_p p + p_z} A, \\ f_3 = \dfrac{p_x - \mathrm{i}p_y}{s_p p - p_z} A, \\ f_4 = A, \end{cases} \quad G = -\mathrm{i}\,\frac{E + scp}{E_0} F. \tag{6.5.2.5}$$

同时

$$E^2 - c^2 p^2 - E_0^2 = 0. \tag{6.5.2.6}$$

所以能量的本征值

$$\begin{cases} E = E_+ = \sqrt{c^2 p^2 + E_0^2}, \\ E = E_- = -\sqrt{c^2 p^2 + E_0^2}. \end{cases} \tag{6.5.2.7}$$

表明粒有正、负两个能量.负能态实际上是其反粒子的正能态,这与狄拉克方程的情况类似.应用时只需取正能态.

下面应用平面波(6.5.2.5)计算粒子的速度.粒子的概率分布为

$$F^\dagger F + G^\dagger G = \left[1 + \frac{(E + scp)^2}{E_0^2}\right] F^\dagger F = \frac{2E(E + scp)}{E_0^2} F^\dagger F.$$

粒子速度在动量 $\boldsymbol{p}$ 方向投影的平均值为

$$\left\langle \boldsymbol{v}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{p}\right\rangle=\frac{[F^{\dagger}G^{\dagger}]\left(\hat{\boldsymbol{v}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{p}\right)\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}}{[F^{\dagger}G^{\dagger}]\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}}=\frac{c[F^{\dagger}G^{\dagger}]\begin{bmatrix}-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{\Sigma}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}}{p(F^{\dagger}F+G^{\dagger}G)}$$

$$=\frac{[F^{\dagger}G^{\dagger}]\begin{bmatrix}E & \mathrm{i}E_0\\ -\mathrm{i}E_0 & E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}}{p(F^{\dagger}F+G^{\dagger}G)}=\frac{c^2p}{E}.$$

与预期的结果一致.

二、自由粒子的球面波

当粒子的 z 向角动量 $J_z=m\hbar$,角动量平方 $J^2=j(j+1)\hbar^2$ 和能量同时确定时为球面波.

能量确定使波函数有共同的因子 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$. 由 J_z 的本征方程

$$\begin{bmatrix}-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}-1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}+1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}F_1 & G_1\\ F_2 & G_2\\ F_3 & G_3\\ F_4 & G_4\end{bmatrix}=r\begin{bmatrix}F_1 & G_1\\ F_2 & G_2\\ F_3 & G_3\\ F_4 & G_4\end{bmatrix}$$

使 F_1,F_4,G_1 和 G_4 中有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$, F_2 和 G_2 中有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}$, F_3 和 G_3 中有因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}$. 由 J^2 的本征方程

$$\begin{bmatrix}\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}+1 & \frac{\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar^2} & \frac{\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar^2} & 1\\ \frac{\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar^2} & \frac{\hat{L}}{\hbar^2}+2-2\frac{\hat{L}_z}{\hbar} & 0 & \frac{\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\\ \frac{\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar^2} & 0 & \hat{L}^2-2+2\frac{\hat{L}_z}{\hbar} & \frac{\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\\ 1 & \frac{\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar} & \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}+1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}F_1 & G_1\\ F_2 & G_2\\ F_3 & G_3\\ F_4 & G_4\end{bmatrix}=j(j+1)\begin{bmatrix}F_1 & G_1\\ F_2 & G_2\\ F_3 & G_3\\ F_4 & G_4\end{bmatrix}$$

知,波函数的形式为

$$\begin{bmatrix}F_1\\F_2\\F_3\\F_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}f_1R_l(r)\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\\ f_2R_l(r)\mathrm{P}_l^{m+1}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\\ f_2R_l(r)\mathrm{P}_l^{m-1}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\\ f_4R_l(r)\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}.$$

应用算式

$$\begin{cases}\dfrac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=-\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=l(l+1)\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},\\ \dfrac{\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{i}\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\\ \qquad=-(l+m)(l-m+1)\mathrm{P}_l^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi},\\ \dfrac{\hat{L}_x+\mathrm{i}\hat{L}_y}{\hbar}\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\dfrac{\cos\theta}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\mathrm{P}_l^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=-\mathrm{P}_l^{m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}.\end{cases}$$

可以得到四个系数之间的关系

$$\begin{cases}[l(l+1)-j(j+1)]f_1+f_1+f_4=(l+m+1)(l-m)f_2+f_3,\\ [l(l+1)-j(j+1)]f_2-2mf_2=f_1+f_4,\\ [l(l+1)-j(j+1)]f_3+2mf_3=(l+m)(l-m+1)(f_1+f_4),\\ [l(l+1)-j(j+1)]f_4+f_1+f_4=(l+m+1)(l-m)f_2+f_3.\end{cases}$$

从中解得 l 在三种不同取值下的系数间的三组关系

$$\begin{cases}f_4=f_1=-(j+m)f_2,\\ f_3=(j+m-1)(j+m)f_2,\end{cases}\quad \text{当 } l=j-1 \text{ 时};$$

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}(f_1+f_4)=-mf_2,\\ f_3=-(j+m)(j-m+1)f_2,\end{cases}\quad \text{当 } l=j \text{ 时};$$

$$\begin{cases}f_4=f_1=(j-m+1)f_2,\\ f_3=(j-m+2)(j-m+1)f_2,\end{cases}\quad \text{当 } l=j+1 \text{ 时}.$$

再考虑到波函数条件(6.5.1.6)，对于 F，即使在 $l=j$ 的情况下也应让

$$f_1=f_4=-mf_2.$$

但是对于 G，当 $l=j$ 时，G_1 与 G_4 就不一定相等，这在下面的三组球面波解中就反映出来了. 由波动方程(6.5.1.5)得 G 与 F 的关系式

$$G=-\begin{bmatrix}\mathrm{i}\varepsilon+\dfrac{\partial}{\partial z} & \dfrac{\partial}{\partial x}-\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y} & 0 & 0\\ \dfrac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y} & \mathrm{i}\varepsilon-\dfrac{\partial}{\partial z} & 0 & 0\\ 0 & 0 & \mathrm{i}\varepsilon+\dfrac{\partial}{\partial z} & \dfrac{\partial}{\partial x}-\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y}\\ 0 & 0 & \dfrac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y} & \mathrm{i}\varepsilon-\dfrac{\partial}{\partial z}\end{bmatrix}\dfrac{F}{\varepsilon_0}.$$

其中，$\varepsilon=\dfrac{E}{\hbar c}$，$\varepsilon_0=\dfrac{E_0}{\hbar c}$. 应用勒让德多项式的运算性质

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial}{\partial z}[bR_l \mathrm{P}_l^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}]+\left(\dfrac{\partial}{\partial x}-\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y}\right)(aR_l \mathrm{P}_l^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}) \\
\quad =\left\{[b+a(l+m)]\dfrac{l+m-1}{2l+1}A_l \mathrm{P}_{l-1}^{m-1}\right. \\
\quad\quad \left.+[b-a(l-m+1)]\dfrac{l-m+2}{2l+1}B_l \mathrm{P}_{l+1}^{m-1}\right\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}, \\
\left(\dfrac{\partial}{\partial x}+\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial y}\right)[bR_l \mathrm{P}_l^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}]-\dfrac{\partial}{\partial z}(aR_l \mathrm{P}_l^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}) \\
\quad =\{-[b+a(l+m)]A_l \mathrm{P}_{l-1}^m+[b-a(l-m+1)]B_l \mathrm{P}_{l+1}^m\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}.
\end{cases}
$$

其中

$$
\begin{cases}
A_l\equiv\dfrac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}+(l+1)\dfrac{R_l}{r}, \\
B_l\equiv\dfrac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}-l\dfrac{R_l}{r}.
\end{cases}
$$

这样从 F 算出 G，便得到了三组独立无关的球面波解：

1. 对于 $l=j-1$

$$
\begin{cases}
F_1=-f_{j-1}(j+m)R_{j-1}\mathrm{P}_{j-1}^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
F_2=f_{j-1}R_{j-1}\mathrm{P}_{j-1}^{m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
F_3=f_{j-1}(j+m)(j+m-1)R_{j-1}\mathrm{P}_{j-1}^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
F_4=-f_{j-1}(j+m)R_{j-1}\mathrm{P}_{j-1}^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
G_1=\dfrac{f_{j-1}}{\varepsilon_0}[(j+m)\mathrm{i}\varepsilon R_{j-1}^m \mathrm{P}_{j-1}^m+(j-m)B_{j-1}\mathrm{P}_j^m]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
G_2=\dfrac{f_{j-1}}{\varepsilon_0}[-\mathrm{i}\varepsilon R_{j-1}^{m+1}+B_{j-1}\mathrm{P}_j^{m+1}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
G_3=\dfrac{f_{j-1}}{\varepsilon_0}[-(j+m)(j+m-1)\mathrm{i}\varepsilon R_{j-1}\mathrm{P}_{j-1}^{m-1} \\
\quad\quad -(j+m)(j-m+1)B_{j-1}\mathrm{P}_j^{m-1}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \\
G_4=\dfrac{f_{j-1}}{\varepsilon_0}[(j+m)\mathrm{i}\varepsilon R_{j-1}^m \mathrm{P}_{j-1}^m-(j+m)B_{j-1}\mathrm{P}_j^m]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}.
\end{cases}
$$

2. 对于 $l=j$

$$
\begin{cases}
F_1 = -f_j m R_j \mathrm{P}_j^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_2 = f_j R_j \mathrm{P}_j^{m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_3 = -f_j(j+m)(j-m+1)R_j\mathrm{P}_j^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_4 = -f_j m R_j \mathrm{P}_j^m \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_1 = \dfrac{f_j}{\varepsilon_0}\left[-\dfrac{(j+1)(j+m)}{2j+1}A_j\mathrm{P}_{j-1}^m + \mathrm{i}\varepsilon m R_j\mathrm{P}_j^m + \dfrac{j(j-m+1)}{2j+1}B_j\mathrm{P}_{j+1}^m\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_2 = \dfrac{f_j}{\varepsilon_0}\left[\dfrac{j+1}{2j+1}A_j\mathrm{P}_{j-1}^{m+1} - \mathrm{i}\varepsilon R_j\mathrm{P}_j^{m+1} + \dfrac{j}{2j+1}B_j\mathrm{P}_{j+1}^{m+1}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_3 = \dfrac{f_j}{\varepsilon_0}\left[\dfrac{(j+1)(j+m)(j+m-1)}{2j+1}A_j\mathrm{P}_{j-1}^{m-1} + \mathrm{i}\varepsilon^{(j+m)(j-m+1)}R_j\mathrm{P}_j^{m-1}\right. \\
\qquad \left. + \dfrac{j(j-m+1)(j-m+2)}{2j+1}B_j\mathrm{P}_{j+1}^{m-1}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_4 = \dfrac{f_j}{\varepsilon_0}\left[-\dfrac{(j+1)(j+m)}{2j+1}A_j\mathrm{P}_{j-1}^m + \mathrm{i}\varepsilon m R_j\mathrm{P}_j^m + \dfrac{j(j-m+1)}{2j+1}B_j\mathrm{P}_{j+1}^m\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}.
\end{cases}
$$

3. 对于 $l=j+1$

$$
\begin{cases}
F_1 = f_{j+1}(j-m+1)R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_2 = f_{j+1}R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^{m+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_3 = f_{j+1}(j-m+2)(j-m+1)R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^{m-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
F_4 = f_{j+1}(j-m+1)R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_1 = \dfrac{f_{j+1}}{\varepsilon_0}[-(j+m+1)A_{j+1}\mathrm{P}_j^m - (j-m+1)\mathrm{i}\varepsilon R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^m]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_2 = \dfrac{f_{j+1}}{\varepsilon_0}[A_{j+1}\mathrm{P}_j^{m+1} - \mathrm{i}\varepsilon R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^{m+1}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m+1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_3 = \dfrac{f_{j+1}}{\varepsilon_0}[-(j+m)(j-m+1)A_{j+1}^{m-1} \\
\qquad -(j-m+2)(j-m+1)\mathrm{i}\varepsilon R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^{m-1}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-1)\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}, \\
G_4 = \dfrac{f_{j+1}}{\varepsilon_0}[(j-m+1)A_{j+1}\mathrm{P}_j^m - (j-m+1)\mathrm{i}\varepsilon R_{j+1}\mathrm{P}_{j+1}^m]\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon ct}.
\end{cases}
$$

在上述解中，f_{j-1}，f_j 和 f_{j+1} 是归一化常数. 而由波动方程(6.5.1.2)知，径向函数 $R_l(r)$ 满足

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}\right)+\left[\varepsilon^2-\varepsilon_0^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0.$$

其解是球贝塞尔函数

$$R_l(r\sqrt{\varepsilon^2-\varepsilon_0^2}) = \sqrt{\frac{\pi}{r\sqrt{\varepsilon^2-\varepsilon_0^2}}}\,J_{l+\frac{1}{2}}(r\sqrt{\varepsilon^2-\varepsilon_0^2}).$$

其中

$$\sqrt{\frac{\pi}{2x}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(x)=x^{l}\left(-\frac{\mathrm{d}}{x\mathrm{d}x}\right)^{l}\frac{\sin x}{x}.$$

上述三组独立无关的解反映的就是自旋与轨道的三种不同耦合状态.

用 K 表示自旋与非相对论性轨道角动量耦合项的量子数,有

$$\dot{\boldsymbol{L}}\cdot\dot{\boldsymbol{S}}\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}=K\hbar^{2}\begin{bmatrix}F\\G\end{bmatrix}.$$

从 $\hat{J}^2$ 的本征方程知,K 有三个取值

$$\begin{cases}K=j-1, & \text{当 } l=j-1 \text{ 时;}\\ K=-1, & \text{当 } l=j \text{ 时;}\\ K=-(j+2), & \text{当 } l=j+1 \text{ 时.}\end{cases}$$

这也可直接从自旋轨道耦合的公式

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{\hbar^{2}}{2}[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)],\quad s=1$$

算出.

参考文献

[1] 周世勋.量子力学.上海:上海科学技术出版社,1961.

[2] 苏汝铿.量子力学.第2版.北京:高等教育出版社,2002.

[3] 张启仁.量子力学.北京:高等教育出版社,1989.

[4] 喀兴林.高等量子力学.第2版.北京:高等教育出版社,2001.

[5] 何宝鹏,熊钰庆.量子场论导论.广州:华南理工大学出版社,1990.

[6] 母国光,战元龄.光学.北京:高等教育出版社,1978.

[7] 哈里德 D,瑞斯尼克 R.物理学:第二卷第二分册.李仲卿,等译.北京:高等教育出版社,1978.

[8] 赵凯华,钟锡华.光学.北京:北京大学出版社,1984.

[9] 钟锡华,骆武刚.光学题解指导.北京:电子工业出版社,1984.

[10] 费曼,等.费曼物理学讲义:第3卷.上海:上海科学技术出版社,1989.

[11] 郭敦仁.数学物理方法.北京:高等教育出版社,1965.

[12] 杨泽森.高等量子力学.北京:北京大学出版社,1991.

[13] 褚圣麟.原子物理学.北京:高等教育出版社,1979.

[14] 杨福家.原子物理学.上海:上海科学技术出版社,1985.

[15] 曹昌祺.电动力学.第2版.北京:人民教育出版社,1962.

[16] 赵凯华,罗蔚茵.新概念物理教程·力学.北京:高等教育出版社,1995.

[17] Hamilton W R. Elements of Quaternions. 3rd ed. New York: Chelsea Publishing Company, 1969.

跋

捧着这部煌煌数十万字的遗著，我感慨万千．送走方官兄转眼两年多了．他家人嘱我为书作跋，我虽力所不逮，却不能推托．对这四元数我并不在行，说点感想吧．

“文革”后期我到汉中分校，就知道方官是虞福春和陈佳洱先生麾下两大理论家之一，但无缘相识．那时基础研究基本上都停了，只有加速器有任务，他在忙 4.5 MV 静电的设计和计算，我则在教比高中程度深一点的《基础物理》．我俩走到一起，是在十多年后．为了加强基础淡化专业，在虞先生指导下改革普通物理，把力、热、电、光、原五门课合并打通，作为一门课来讲．为此才把方官从加速器抽出来．这一讲就是十多年．其间我应国外朋友之邀去合作研究，中途退出，留下方官坚守，直到退休．那时我主持系里教务，从微薄的经费中为主讲教师分别订了《大学物理》和《大学化学》杂志，方官就有文章在上面发表．他写这四元数物理，大约从那时就开始了．方官后半生的主要成就，除了学生，就是这部大作．写这本书，不止是“十年铸一剑”．

我这人是个杂家，自小就对各种稀奇古怪的东西感兴趣，一进北大，就在图书馆的书堆里发现了这四元数(quaternion)，但不求甚解，只是知道而已．现在学物理的，很少知道和玩这四元数了．其实，发明四元数的，还是一位大物理学家．故事要追溯到 19 世纪上半叶．从 21 岁就开始做爱尔兰钦天监(天文台长)的哈密顿(William Rowan Hamilton，1805—1865)，在完成他关于分析力学和光学的工作后，就于 1835 年转向了代数．那时复数是一个研究的热点，他想，既然二重数组(doublet)可以相乘，那么三重数组(triplet)呢？这个问题困扰了他将近十年，直到 1843 年 10 月 16 日．后来他在给儿子的信中回忆说：“在那个月的上半月，每天早上我下楼吃早饭时，你兄弟威廉・埃德温(William Edwin)和你总要问我，‘嗯，老爸，你能不能乘三重数组？’我则使劲摇头，回答说，‘不行，我只能加减它们．’”那天他和太太沿着都柏林皇家运河散步时，突然想出了方程 $\boldsymbol{i}^2=\boldsymbol{j}^2=\boldsymbol{k}^2=\boldsymbol{ijk}=-1$ 的解．太激动了，他掏出刀子，把解答刻在了布鲁穆桥(Brougham Bridge)的石头上．那座桥现称金雀花桥(Broom Bridge)[①②]．

在这之后，四元数的研究一度非常热，甚至引起亥维赛(Oliver Heaviside,

---

① http //world std com/ sweetser/quaternions/intro/history/history html

② 四元数——百度百科

1850—1925)和泰特(Peter Guthrie Tait，1831—1901)这两位大物理学家之间的争吵，数学家克利福德(William Kingdon Clifford，1826—1883)则于1873—1876年把四元数推广成八元数(octonion)[①]. 直到19世纪末，四元数研究都广为流行，甚至有一个"四元数及数学相关系统研究国际促进协会". 哈密顿则把余生全部用于研究四元数和寻找它的应用，于1853年出版了《关于四元数的演讲》，1866年出版了遗著《四元数概论》，后者即方官书末所列参考文献[17].

几乎与哈密顿同时，德国数学家格拉斯曼(Hermann Grassmann，1809—1877)于1844年提出维度理论(ausdehnungslehre)，建立了一种 n 维空间的几何，在其中定义了 n 维矢量的运算. 在美国物理学家吉布斯(John Willard Gibbs，1839—1903)和英国物理学家亥维赛的努力下，矢量运算在物理学中成为宠儿. 事实上，矢量运算也是四元数运算的一部分，矢量这个名字就是哈密顿起的. 在这个意义上，四元数已经在物理学中留下了永久的印迹.

虽然哈密顿和格拉斯曼的理论都是矢量代数发展的源头，但四元数的运算包含了比矢量代数更多的东西. 吉布斯曾经说过，他更喜欢格拉斯曼的限制较少的概念[②]. 普遍与简洁是物理学永恒的追求. 不过，有些物理用四元数有它的长处，比如方官这部书涉及的狭义相对论时空观、相对论力学、电磁学和相对论性量子力学. 它们的共同点，是都要用四维时空来描述. 时间与空间毕竟还是不同，后者构成三维矢量空间. 所以四维的时空，用四元数来处理就是一种自然的选择.

当初发现的不是三重数组而是四重数组，是四维的，这完全出乎哈密顿的预料. 所以，他最初的反应是舍弃第四维，令它为0，而称余下的部分为"固有四元数"(proper quaternion)[③]. 他万万没有想到，在身后40年会出来一个相对论，这正是他整个后半生苦苦寻找孜孜以求的四元数最重要的应用. 四元数天造地设般地与四维时空一一对应，这造化之神奇既令人惊叹，更让人敬畏. 如果相对论早出世半个世纪，没准物理的主流就是四元数的，谁知道呢?

涉及狭义相对论的物理，是四维时空中的物理，现在流行的做法，是用虚时坐标的欧氏空间，或用时空度规的闵氏空间. 相比之下，采用四元数的做法，有点像是另类或者异数. 当然，在学术上不靠人脉，不看人气，不玩少数服从多数，不讲成王败寇. 学术问题有它自己的玩法(play rule). 自古英雄出少年，天才大抵是另类. 所以，虽然不在物理的主流，这个领域仍然相当活跃，玩四元数物理的大有人在，方官并不孤立.

狭义相对论的基本出发点，是四维时空的转动不变性，即时空间隔不随坐标

---

① D J 斯特洛伊克. 数学简史. 关娴，译. 北京：科学出版社，1956.
② 格拉斯曼——百度百科.
③ Md Shah Alam. Physics Essays，2011，24：2.

的转动而改变. 用四元数来说，就是时空双四元数的模方不变. 所以，狭义相对论可以完全等效地用四元数来表述，这在意料之中. 相对论力学的核心，是能量动量构成四维不变量，这又是一种双四元数不变的模方，所以相对论力学也可以纳入四元数的框架之中. 电磁场是一种最简单的规范场，从相对性原理和定域规范不变性原理出发，可以严格和逻辑地得到麦克斯韦方程组和洛伦兹力的公式，也就是得到库仑定律、安培定律、法拉第电磁感应定律和磁场无源定律等实验定律[①]. 所以，时空双四元数的模方不变性加上定域规范不变性，就可以得到全部电磁学. 最后，四元数的四个基 $1,\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 对应于 2×2 的单位矩阵和三个泡利矩阵的集合，所以凡是涉及旋转的问题，特别是量子力学中的自旋以及狄拉克旋量，自然也可以用四元数来做. 英国《自然》杂志前主编玛多仕 (John Maddox, 1925—2009)在对我国物理学家陈难先(清华大学教授，中国科学院院士)一个工作的评论中就曾说过："全部数学都有应用的潜力，数学家们在文献中凌乱地扔了一些珍贵的技巧，等着人们来发现其用途. 简单说吧，19 世纪备受关注的连分数，被证明在场论里用得着，不是吗? 为了使得矢量代数完备而定义一个商，从而才发明的哈密顿四元数，不也发现与相对论性量子力学的旋量代数有着有趣的联系吗?"[②]真的，方官就与严亮合作写过一篇论文《四元数在力学和电磁学中的应用》，与陆元荣合作写过一篇论文《四元数在量子力学中的应用》，2001 年先后发表于《大学物理》[③][④].

英雄所见略同，所以可在文献中找到许多方官的同道. 举例来说，如马来西亚的萨哈拉姆，他用四元数推导洛伦兹变换及其速度相加公式，并讨论了有关的性质和应用，论文《四元数洛伦兹变换》发表于 2011 年[⑤]. 这是关于狭义相对论的时空观. 关于力学，如美国南加州大学的伍德瓦嘉和沙特，他们推导出刚体转动动力学的四元数方程，论文发表于 2010 年[⑥]. 关于电磁学，如美国纽约州立大学水牛城分校的温南斯，他把真空中的麦克斯韦电磁方程表达成单个的四元数方程，论文《四元数物理量》发表于 1977 年[⑦]. 而更早一些，爱德蒙斯就提出可以把电荷当做四元数[⑧]. 关于量子力学，有意大利斯科拉里西和索罗布里诺的论文《磁群的四元数表示》，于 1997 年发表于数学物理杂志[⑨]，美国普林斯顿高等研究院

---

① 王正行 近代物理学 第 2 版 北京 北京大学出版社，2010
② J Maddox Mobius and problems of inversion Nature, 1990, 344 377
③ 许方官，严亮 大学物理 2001, No 9, 20 30
④ 许方官，陆元荣 大学物理 2001, No 11, 20 21
⑤ Md Shah Alam. Physics Essays, 2011, 24 2
⑥ Firdaus E Udwadia, Aaron D Schutte Journal of Applied Mechanics, 2010, 77 044505
⑦ J Gibson Winans Foundations of Physics, 1977, 7 341
⑧ J D Edmonds Foundations of Physics, 1973, 3 313, American Journal of Physics, 1974, 42 · 220
⑨ G Scolarici, L Solombrino Journal of Mathematical Physics, 1997, 38 1147

的阿德勒甚至写了专著《四元数量子力学和量子场》，于 1995 年由牛津大学出版社出版[①]. 而关于量子场论中的规范场，则有印度比仕特和奈吉的论文《戴孙的阿贝尔与非阿贝尔规范理论的四元数-八元数的解析性》，发表于 2008 年[②]，还有印度普士帕、比仕特、奈吉和中国科学院理论物理研究所李田军合作的论文《用四元数八元数重新表述量子色动力学》，发表于 2011 年[③].

以上所举，还都是四元数在物理学中的应用. 在工程、电脑和制图等实用领域，四元数的应用就更加活跃，有的甚至扮演了主角. 所以，在美国的大学里，有讲授四元数应用的课程，也有专门讨论四元数教学方法的文章[④]，这里就不多说.

或许有人会问，现在流行的做法已经很好，还另起炉灶用四元数来做，有必要吗? 这就用得着费曼(R P Feynman, 1918—1988)的一句话："完全针对同一个物理，每个好一点的理论物理学家都知道六七种不同的理论表述."[⑤]. 不同的表述虽然在数学和形式上等效，在物理上却不一定相同. 氢原子光谱的巴尔末公式与里德伯公式在数学上完全等价，但只是从里德伯公式，玻尔才悟出他的七巧板的最后一块，构造出著名的氢原子模型. 玻恩把海森伯二元数组的指标简单地改写了一下，才发现这正是矩阵，从而建立了矩阵力学，也就是量子力学. 他们和约当以及狄拉克创建量子力学时，是从哈密顿正则力学出发，薛定谔创建波动力学时，则是从哈密顿-雅可比方程出发，虽然经典力学的这两种表述都与牛顿三定律等效. 例子太多了. 说不定将来理论的突破就是从四元数物理开始，谁敢说不呢? 这就只能让时间来裁判.

这类研究型著作，不可避免会有见仁见智的问题. 可惜方官已经走了，不可能再向他讨教. 事实上，作为研究型著作，通常还会提到这个领域其他人的工作，让读者对各个相关的研究有所了解，并注出文献，为读者进一步查阅提供方便. 方官的书中没有这些内容. 当然，这并不是必需的，不影响本书的水准和价值. 方官的工作即便与别人有交集，也绝不可能完全相同，因为他是独立的. 正如我国著名理论物理学家王竹溪先生所说，对于同一个题目，两个人互相独立地去做，结果不可能完全雷同[⑥]. 而且，如果知道方官写作的情景，对此也就不会苛求了.

人生的旅途真的是各不相同. 方官的最后十年，每周要去北医三院做两三次透析，走得很苦. 可以说，他的这部著作，是在这种被病痛封闭挟制恐吓折磨的炼

---

① S L Adler. Quaternionic Quantum Mechanics and Quantum Fields. New York: Oxford University, 1995.

② P S Bisht, O R S Negi. International Journal of Theoretical Physics, 2008, 47: 1497.

③ Pushpa, P S Bisht, Tianjun Li, O P S Negi. International Journal of Theoretical Physics, 2011, 50: 594.

④ J McDonald. Computer Graphics Forum, 2010, 29: 2447.

⑤ 费曼 R P. 物理定律的本性. 关洪译. 长沙:湖南科学技术出版社, 2005.

⑥ 王正行. 严谨与简洁之美——王竹溪一生的物理追求. 北京:北京大学出版社, 2008.

狱中铸就的. 他不能参加学术会议与人交流，不能奔波于图书馆查阅各种资料，当时的网络也还没有现在这样全面便捷的搜索服务，而他还要时时应对病魔的纠缠. 在这艰难困苦的条件下，方官争分夺秒，不屈不挠，为我们留下了这份弥足珍贵的遗著. 我想在此再说一句：谢谢方官，你安息吧.

王正行

2012 年早春

于北京大学物理学院